

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ**  
**INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**TESE DE DOUTORADO**

**Simulação Numérica em CFD do Processo de  
Oxi-Combustão Aplicado ao Carvão Mineral  
Brasileiro para a Geração Termoelétrica**

**Autor: Fábio Santos Nascimento**

**Orientador: Prof. Dr. Christian Jeremi Rodriguez Coronado**

**Coorientador: Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento**

Itajubá, 02 de Março de 2018

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ**  
**INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**Fábio Santos Nascimento**

**Simulação Numérica em CFD do Processo de  
Oxi-Combustão Aplicado ao Carvão Mineral  
Brasileiro para a Geração Termoelétrica**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para  
obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Curso: **Doutorado em Engenharia Mecânica**  
Área de Concentração: **Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo**

Orientador: **Prof. Dr. Christian Jeremi Rodriguez Coronado**  
Coorientador: **Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento**

Itajubá, 02 de Março de 2018  
MG – Brasil

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ**  
**INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**TESE DE DOUTORADO**

**Simulação Numérica em CFD do Processo de  
Oxi-Combustão Aplicado ao Carvão Mineral  
Brasileiro para a Geração Termoelétrica**

**Autor: Fábio Santos Nascimento**

**Orientador: Prof. Dr. Christian Jeremi Rodriguez Coronado**

**Coorientador: Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento**

Composição da Banca Examinadora:

**Prof. Dr. João Andrade de Carvalho Junior – UNESP/FEG**

**Prof. Dr. Pedro Teixeira Lacava - ITA**

**Prof. Dr. Fagner Luís Goulart Dias – UNIFEI**

**Prof. Dr. Genésio José Menon - UNIFEI**

**Prof. Dr. Christian Jeremi Rodriguez Coronado (Orientador) – UNIFEI**

## Dedicatória

Este trabalho é dedicado à minha esposa **Mauricéia** e ao meu filho **Davi**, que estiveram ao meu lado em mais uma conquista, bem como aos meus **pais** e meu **irmão**.

## Agradecimentos

Agradeço à Deus por dar-me forças e, iluminar minha vida durante a caminhada desafiadora do doutorado e, dar-me forças para seguir sempre em frente.

Agradeço ao orientador Professor Doutor Christian pela ajuda e disponibilidade na realização deste trabalho.

Agradeço ao coorientador Professor Marco Antônio pela orientação, auxílio e por contribuir significativamente para o desenvolvimento desta tese.

Agradeço a Professora de português Helia Maria Rocha pela correção da gramática desta tese e as demais pessoas que contribuíram direta ou indiretamente nesse trabalho.

Agradeço minha esposa Mauricéia por estar sempre ao meu lado em todos os momentos e, ao meu filho Davi por alegrar minha vida, fornecendo-me motivação para continuar lutando.

Aos meus pais, por terem primado pela minha educação e por estarem sempre ao meu lado.

À Universidade Federal de Itajubá pela oportunidade de uma formação acadêmica e profissional de excelente qualidade.

Agradeço à ANSYS ESSS pelo suporte técnico fornecido ao longo do trabalho e também à CAPES, e ao CNPq pelo apoio financeiro fornecido durante o período de desenvolvimento deste trabalho.

*"No meio da dificuldade encontra-se a oportunidade."*

*Albert Einstein*

## Resumo

NASCIMENTO, F. S. (2018), *Simulação Numérica em CFD do Processo de Oxi-Combustão Aplicado ao Carvão Mineral Brasileiro para a Geração Termoelétrica*. Itajubá, 146p. Tese de Doutorado, Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

O presente trabalho utilizou-se da ferramenta computacional ANSYS CFX para realizar a análise termoquímica do processo de oxi-combustão do carvão mineral brasileiro CE 5200, visando a sua utilização na geração termoelétrica nacional. Fez-se o estudo do carvão mineral devido que o combustível é uma fonte de energia que pode ser utilizado para a geração termoelétrica, mas o processo da combustão convencional do carvão é altamente poluente, emitindo uma grande concentração de CO<sub>2</sub> para a atmosfera, que é um dos responsáveis pelo efeito estufa. Uma validação dos modelos de turbulência, combustão, radiação e cinética química no processo de oxi-combustão foi realizada com os resultados do experimento do carvão mineral Rhenish, em um forno de queda livre de 100 kW. De forma que posteriormente, realizou um aporte térmico, com a utilização do modelo da validação, na introdução do carvão CE 5200 no mesmo forno de queda livre do carvão Rhenish. Os resultados foram comparados com os resultados do carvão Rhenish. O carvão CE 5200 apresenta comportamento muito próximos do carvão Rhenish, apesar de ter maior quantidade de cinzas. A temperatura produzida pelo carvão CE 5200, no interior do forno ficou abaixo da temperatura de fusão das cinzas, assim evitando paradas indesejáveis do forno. Assim o comportamento do carvão CE 5200 apresenta viabilidade térmica para sua utilização em centrais termelétricas a carvão no processo de oxi-combustão.

**Palavras-chave:** oxi-combustão; carvão mineral brasileiro; ANSYS CFX.

## Abstract

NASCIMENTO, F. S. (2018), Numerical Simulation in CFD of the Oxi-Combustion Process Applied to Brazilian Mineral Coal for the Thermoelectric Generation. Itajubá, 146p. Doctoral Thesis, Post-graduation in Mechanical Engineering, Federal University of Itajubá.

The present work used the computational tool ANSYS CFX to perform the thermochemical analysis of the oxy-combustion process of the Brazilian mineral coal CE 5200, aiming at its use in the national thermoelectric generation. The study of coal was carried out because the fuel is an energy source that can be used for thermoelectric generation, but the process of conventional coal combustion is highly polluting, emitting a large concentration of CO<sub>2</sub> into the atmosphere, which is one of those responsible for the greenhouse effect. A validation of the turbulence, combustion, radiation and chemical kinetics models in the oxy-combustion process was carried out with the results of the Rhenish coal experiment in a 100 kW drop down furnace. Afterwards, it performed a thermal input, using the validation model, in the introduction of the CE 5200 coal in the same Rhenish coal drop down furnace. The results were compared with the results of Rhenish coal. The CE 5200 coal presents behavior very close to the Rhenish coal, in spite of having greater amount of ashes. The temperature produced by the CE 5200 coal inside the furnace was below the melting temperature of the ashes, thus avoiding undesirable stopping of the furnace. Thus the behavior of the CE 5200 coal presents thermal viability for its use in coal-fired power plants in the oxy-combustion process.

**Keywords:** oxy-combustion; Brazilian mineral coal; ANSYS CFX.



## Sumário

|  |       |
|--|-------|
| Dedicatória.....   | iv    |
| Agradecimentos.....  | v     |
| Resumo.....  | vii   |
| Abstract.....  | viii  |
| Sumário.....   | ix    |
| Lista de Figuras.....  | xii   |
| Lista de Tabelas.....  | xv    |
| Simbologia.....  | xviii |
| 1. INTRODUÇÃO.....   | 1     |
| 1.1. Motivações.....   | 1     |
| 1.2. Objetivo Geral .....  | 5     |
| 1.3. Objetivos Específicos .....   | 5     |
| 1.4. Estrutura do Trabalho .....   | 6     |
| 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....  | 8     |
| 2.1. Estudo da Viabilidade Econômica.....                                  | 9     |
| 2.2. Estudos Experimentais.....  | 10    |
| 2.3. Estudos Experimentais com Análise em CFD.....                         | 15    |
| 2.4. Simulação de Oxi-Combustão em CFD .....                               | 19    |
| 2.5. Simulação Numérica no Brasil com ou sem Oxi-Combustão .....           | 24    |
| 3. MODELOS MATEMÁTICOS NA DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL<br>(CFD)..... | 28    |

|  |    |
|--|----|
| 3.1. Equações Governantes do Problema .....                            | 29 |
| 3.1.1. Equações da continuidade.....                                   | 29 |
| 3.1.2. Equações da quantidade do movimento .....                       | 30 |
| 3.1.3. Equações da energia .....                                       | 33 |
| 3.2. Turbulência .....   | 35 |
| 3.2.1. Equações médias de Reynolds (RANS) .....                        | 37 |
| 3.2.2. Modelos de turbulência.....                                     | 40 |
| 3.2.3. Comparação entre os modelos de turbulência .....                | 47 |
| 3.3. Desvolatilização.....   | 48 |
| 3.3.1 Modelo de desvolatilização .....                                 | 49 |
| 3.4. Reação do <i>Char</i> .....                                       | 50 |
| 3.4.1. Modelos de oxidação do <i>char</i> .....                        | 51 |
| 3.5. Modelos de Combustão (Interação Combustão-Turbulência).....       | 54 |
| 3.5.1. Modelo Eddy Dissipation (ED) .....                              | 55 |
| 3.5.2. Modelo Eddy Dissipation/Finite Rate Chemistry (EDFR).....       | 56 |
| 3.5.3. Modelo Finite Rate Chemistry (FRC) .....                        | 57 |
| 3.6. Modelo de Reações dos Voláteis .....                              | 58 |
| 3.7. Modelo de Radiação .....  | 59 |
| 3.7.1 . Modelo Discret Transfer (DTM) .....                            | 61 |
| 3.7.2 . Modelo P1.....   | 61 |
| 3.7.3 . Modelo Monte Carlo (MC).....                                   | 62 |
| 3.8. Metodologia Empregada na Simulação Numérica da Oxi-Combustão..... | 63 |
| 4. VALIDAÇÃO DOS MODELOS UTILIZADOS NO CFX.....                        | 65 |
| 4.1. Geometria e Funcionamento do Experimento .....                    | 66 |
| 4.2. Preparação da Geometria para Simulação .....                      | 68 |
| 4.3. Malha Computacional.....  | 69 |
| 4.4. Dados Operacionais do Experimento .....                           | 71 |
| 4.5. Modelos Matemáticos para a Simulação da Oxi-Combustão.....        | 75 |
| 4.6. Simulação .....   | 77 |
| 4.6.1. Raio do forno na distância axial 0,025 [m] do queimador.....    | 78 |
| 4.6.2. Raio do forno na distância axial 0,05 [m] do queimador.....     | 79 |
| 4.6.3. Raio do forno na distância axial 0,2 [m] do queimador.....      | 85 |

|   |            |
|---|------------|
| 4.6.4. Raio do forno na distância axial 0,3 [m] do queimador.....                           | 89         |
| 4.6.5. Raio do forno na distância axial 0,5 [m] do queimador.....                           | 94         |
| 4.6.6. Campo de velocidade axial.....   | 97         |
| 4.6.7. Campo de temperatura.....  | 98         |
| <b>5. RESULTADOS E ANÁLISE DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA EM CFD DO CARVÃO MINERAL NACIONAL.....</b> | <b>102</b> |
| 5.1. Características do Carvão Nacional CE 5200.....  | 102        |
| 5.2. Geometria Simulada.....  | 104        |
| 5.3. Malha Utilizada para Simulação do Carvão CE 5200.....                                  | 104        |
| 5.4. Modelos Utilizados na Simulação do Carvão CE 5200.....                                 | 105        |
| 5.5. Cálculo do Aporte Térmico.....   | 106        |
| 5.6. Resultados da Simulação no Forno de 100 kW com Carvão CE 5200.....                     | 109        |
| 5.6.1. Velocidade axial ao longo dos raios.....   | 110        |
| 5.6.2. Temperatura ao longo dos raios.....  | 115        |
| 5.6.3. Fração volumétrica de O <sub>2</sub> ao longo dos raios.....                         | 120        |
| 5.6.4. Fração volumétrica de CO ao longo dos raios.....                                     | 125        |
| 5.6.5. Fração volumétrica de CO <sub>2</sub> ao longo dos raios.....                        | 129        |
| 5.6.6. Fração volumétrica de H <sub>2</sub> O ao longo dos raios.....                       | 133        |
| <b>6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS.....</b>                                  | <b>137</b> |
| 6.1. Conclusões.....  | 137        |
| 6.2. Sugestões de Trabalhos Futuros.....  | 140        |
| <b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICA.....</b>   | <b>141</b> |

## Lista de Figuras

|  |    |
|--|----|
| Figura 2.1 - Desenho esquemático do combustor de carvão de 20 kW (LIU <i>et al.</i> 2005). .....                                   | 11 |
| Figura 2.2 – Esquema da configuração do combustor B de CANMET, modificado de Chui <i>et al.</i> (2004) .....                       | 17 |
| Figura 2.3 – Disposição geral da caldeira e término do domínio (ZIEMNICZAC e da SILVA, 2012). .....                                | 25 |
| Figura 3.1 – Grau de modelagem versus custo computacional dos modelos de turbulência (REZENDE, 2009). .....                        | 37 |
| Figura 3.2 - Composição do carvão mineral CE 5200. ....  | 49 |
| Figura 3.3 – Modelos de combustão disponíveis no ANSYS (ANSYS INC, 2013). .....  | 55 |
| Figura 3.4 - Intensidade da radiação e os parâmetros que afetam (SILVA, 2015). ....  | 59 |
| Figura 4.1 – Geometria da seção transversal de um quarto do forno, visão geral, modificado de Warzecha e Boguslawski (2014). ..... | 67 |
| Figura 4.2 – Geometria do queimador, dimensões da entrada em m, modificado de Warzecha e Boguslawski (2014). .....                 | 67 |
| Figura 4.3 – Nomenclatura das partes do forno criado em Solidworks. ....   | 68 |
| Figura 4.4 – Vista da malha do forno. ....   | 69 |
| Figura 4.5 – Vista periódica da malha do forno. ....   | 70 |
| Figura 4.6 – Localização dos raios de medição no forno de 100 kW ensaiado por Toporov <i>et al.</i> (2008). ....                   | 74 |
| Figura 4.7 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,025 [m]. .....  | 78 |

|   |  |
|---|--|
| Figura 4.8 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,05 [m]... 80   | Figura 4.9 – Temperatura ao longo do raio do forno na distância axial 0,05 [m]..... 82   |
| Figura 4.10 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> ao longo do raio do forno na distância axial 0,05 [m].<br>..... 84                 | Figura 4.11 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,2 [m]. ..... 85  |
| Figura 4.12 – Temperatura axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,2 [m]. ..... 87  | Figura 4.13 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> ao longo do raio do forno na distância axial 0,2 [m]88                              |
| Figura 4.14 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,3 [m]..... 90   | Figura 4.15 – Temperatura ao longo do raio do forno na distância axial 0,3 [m]. ..... 91   |
| Figura 4.16 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> ao longo do raio do forno na distância axial 0,3 [m].<br>..... 93                  | Figura 4.17 – Temperatura ao longo do raio do forno na distância axial 0,5 [m]. ..... 94   |
| Figura 4.18 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> ao longo do raio do forno na distância axial 0,5 [m].<br>..... 95                  | Figura 4.19 – Campo de velocidade axial no forno cilíndrico. a) k-ε padrão e b) SST. .... 98   |
| Figura 4.20 – Campo de temperatura no forno cilíndrico. a) k-ε padrão e b) SST. .... 99   | Figura 5.1 - Velocidade axial dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,025 [m] do<br>queimador..... 111                      |
| Figura 5.2 - Velocidade axial dos CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m]..... 112  | Figura 5.3 - Velocidade axial dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m]. ... 113  |
| Figura 5.4- Velocidade axial dos CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m]..... 114  | Figura 5.5 – Campo de velocidade axial para os carvões (a) CE5200 e (b) Rhenish..... 114   |
| Figura 5.6 – Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m]. ..... 116   | Figura 5.7 – Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m]. ..... 117   |
| Figura 5.8 - Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m]..... 118  | Figura 5.9 - Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m]..... 118   |
| Figura 5.10 – Campo de temperatura dos carvões a) CE 5200 e b) Rhenish ..... 119  | Figura 5.11 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05<br>[m] do queimador. .... 121 |
| Figura 5.12 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2<br>[m] do queimador. .... 122 |  |

|   |     |
|---|-----|
| Figura 5.13 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....    | 123 |
| Figura 5.14 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador. ....    | 124 |
| Figura 5.15 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador. ....               | 126 |
| Figura 5.16 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador. ....                | 127 |
| Figura 5.17 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....                | 128 |
| Figura 5.18 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador. ....                | 128 |
| Figura 5.19 – Fração volumétrica de CO <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador. ....  | 130 |
| Figura 5.20 – Fração volumétrica de CO <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador. ....   | 131 |
| Figura 5.21 – Fração volumétrica de CO <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....   | 131 |
| Figura 5.22 – Fração volumétrica de CO <sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador. ....   | 132 |
| Figura 5.23 – Fração volumétrica de H <sub>2</sub> O dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador. .... | 133 |
| Figura 5.24 – Fração volumétrica de H <sub>2</sub> O dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador. ....  | 134 |
| Figura 5.25 – Fração volumétrica de H <sub>2</sub> O dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....  | 135 |
| Figura 5.26 – Fração volumétrica de H <sub>2</sub> O dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador. ....  | 136 |

## Lista de Tabelas

|  |    |
|--|----|
| Tabela 2.1 – Composição dos oligoelementos do carvão Yallourn utilizado no experimento (ROY e BHATTACHARYA, 2014). .....                                 | 14 |
| Tabela 3.1 – Vantagens e desvantagens dos modelos de turbulência analisados nessa tese (KANGWANPONGPAN, 2013). .....                                     | 47 |
| Tabela 3.2 – Descrição dos modelos que foram selecionados na oxi-combustão do forno de 100 kW. Modificado de Kangwanpongpan (2013). .....                | 63 |
| Tabela 3.3 – Modelos utilizados na simulação numérica para validação do experimento em ANSYS CFX. ....   | 64 |
| Tabela 4.1 – Descrição do cluster utilizado para as simulações.....  | 66 |
| Tabela 4.2 – Fração volumétrica de O <sub>2</sub> e CO <sub>2</sub> em cada entrada, modificado de Kangwanpongpan (2013). .....                          | 67 |
| Tabela 4.3 – Valores de vários métodos da qualidade das malhas.....  | 70 |
| Tabela 4.4 - Parâmetros utilizados para a geração do <i>swirl</i> no forno vertical de 100 kW <sub>th</sub> , modificado de Kangwanpongpan (2013). ..... | 71 |
| Tabela 4.5 - Parâmetros de corrente de entrada utilizados no forno vertical de 100 kW <sub>th</sub> , modificado de Kangwanpongpan (2013). .....         | 72 |
| Tabela 4.6 - Parâmetros utilizados nas paredes do forno vertical de 100 kW, modificado de Kangwanpongpan (2013). .....                                   | 72 |
| Tabela 4.7 – Parâmetros pré-calculados utilizados como dados de entrada no ANSYS CFX, modificado de Kangwanpongpan (2013). .....                         | 72 |

|  |    |
|--|----|
| Tabela 4.8 – Propriedades do carvão mineral linhito Renish ensaiado, modificado de Kangwanpongpan (2013). .....  | 73 |
| Tabela 4.9 – Parâmetros usados no mecanismo de um passo da desvolatilização dos voláteis (CHEN, L., 2013). .....   | 73 |
| Tabela 4.10 – Parâmetros inseridos no ANSYS CFX para a oxidação do <i>char</i> . .....   | 74 |
| Tabela 4.11 – Os autores que investigaram as reações dos voláteis de 3 passos com o modelo EDFR. ....  | 75 |
| Tabela 4.12 - Parâmetros da cinética química simulados para a oxidação do material volátil VM, CO e H <sub>2</sub> , modificado de Kangwanpongpan (2013). .....          | 76 |
| Tabela 4.13 – Opções utilizadas para o modelo radioativo. ....   | 76 |
| Tabela 4.14 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,025 [m] do queimador. ....                     | 79 |
| Tabela 4.15 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,05 [m] do queimador. ....                      | 81 |
| Tabela 4.16 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,05 [m] do queimador. ....                           | 83 |
| Tabela 4.17 – Medidas das frações volumétricas de O <sub>2</sub> experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,05 [m] do queimador. .... | 84 |
| Tabela 4.18 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,2 [m] do queimador. ....                       | 86 |
| Tabela 4.19 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,2 [m] do queimador. ....                            | 87 |
| Tabela 4.20 – Medidas das frações volumétricas de O <sub>2</sub> experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,2 [m] do queimador. ....  | 89 |
| Tabela 4.21 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....                       | 90 |
| Tabela 4.22 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....                            | 92 |
| Tabela 4.23 – Medidas das frações volumétricas de O <sub>2</sub> experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,3 [m] do queimador. ....  | 93 |
| Tabela 4.24 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,5 [m] do queimador . ....                           | 95 |



|   |     |
|---|-----|
| Tabela 4.25 – Medidas das frações volumétricas de O <sub>2</sub> experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,5 [m] do queimador. .... | 96  |
| Tabela 5.1 – Produção do carvão mineral beneficiado CE 5200 por empresa, modificada do Departamento Nacional de Produção Mineral (2007).....                            | 103 |
| Tabela 5.2 – Propriedade do carvão mineral beneficiado CE 5200. ....  | 103 |
| Tabela 5.3 - Modelos utilizados na simulação numérica para simulação do carvão CE 5200. ....  | 105 |
| Tabela 5.4 - Parâmetros inseridos no CFX ANSYS para a oxidação dos voláteis.....  | 106 |
| Tabela 5.5 – Parâmetros calculados para obtenção da vazão mássica em cada entrada. ....   | 108 |
| Tabela 5.6 - Parâmetros de corrente de entrada utilizados no forno vertical para o carvão CE 5200. ....   | 109 |

## Simbologia

### Letras Latinas

|            |   |
|------------|---|
| $A_v$      | Fator pré-exponencial [ $s^{-1}$ ] ou [ $kg\ m^2/s^{-1}$ ]              |
| $b_{ij}$   | Tensor anisotrópico   |
| B          | Reação inversa  |
| $BD_i$     | Soma das forças de contato agindo no fluido $i$                         |
| $C_{ij}$   | Transporte convectivo   |
| $C_p$      | Calor específico [ $kJ/kg\ K$ ]   |
| $C_\mu$    | Parâmetro constante do modelo de turbulência                            |
| D          | Coefficiente de difusão externa do oxigênio no gás ao redor [ $m^2/s$ ] |
| $D_{L,ij}$ | Taxa de difusão do tensor de Reynolds                                   |
| $D_{ref}$  | Difusividade dinâmica   |
| Da         | Parâmetro adimensional Damköhler [-]                                    |
| $D_h$      | Diâmetro hidráulico [ $m$ ]   |
| $e_g$      | Energia interna específica [ $J/kg$ ]                                   |
| $e_{ikm}$  | Permutação  |
| $e_p$      | Energia interna da partícula [ $J$ ]                                    |
| $E_{bv}$   | Emissão total do corpo negro [ $W/m^2$ ]                                |
| $E_v$      | Energia de ativação [ $J/kmol$ ]  |

|               |  |
|---------------|--|
| F             | Reação direta  |
| $F_{ij}$      | Termo de produção devido à rotação   |
| $f_{p,i}$     | Força aerodinâmica agindo na partícula por unidade de volume da mistura                  |
| $f_{v,0}$     | Fração mássica de matéria volátil na base seca [-] ou [%]                                |
| $f_{w,0}$     | Fração mássica de umidade inicial [-] ou [%]   |
| $FV$          | Fração volumétrica da fase gasosa que é ocupado pela mistura gás-partícula [-] ou [%]    |
| $G_b$         | Energia cinética turbulenta gerada devido ao gradiente de gravidade [ $J$ ]              |
| $G_k$         | Energia cinética turbulenta gerada devido ao gradiente de velocidade média [ $J$ ]       |
| $\tilde{G}_k$ | Energia cinética turbulenta devido ao gradiente de velocidade média                      |
| $G_v$         | Radiação incidente espectral [ $J$ ]   |
| $h_g$         | Entalpia específica do gás [ $kJ/kg$ ]   |
| $\bar{h}$     | Entalpia específica média do gás sobre a superfície de controle da partícula [ $kJ/kg$ ] |
| $[I]$         | Concentração molar dos componentes reagentes [ $mol$ ]                                   |
| $I_b$         | Intensidade de emissão de corpo negro [ $W/m^2$ ]  |
| $I_{turb}$    | Intensidade turbulenta [ $m$ ]   |
| $I_v$         | Intensidade de radiação espectral [ $W/m^2$ ]  |
| $I_{v0}$      | Intensidade de radiação que sai da fonte [ $W/m^2$ ]                                     |
| K             | Energia cinética turbulenta [ $J$ ]  |
| $\bar{k}$     | Energia cinética turbulenta média [ $J$ ]  |
| $K_a$         | Coefficiente de absorção   |
| $k_c$         | Coefficiente para a taxa de reação química ou taxa de oxidação do carbono                |
| $K_s$         | Coefficiente de espalhamento   |
| $k_v$         | Constante na forma de Arrhenius  |
| $k_1$         | Taxa de difusão externa  |
| $k_2$         | Taxa de reação superficial   |
| $k_3$         | Taxa de difusão interna e reação superficial   |
| L             | <i>Eddy length scale</i> [ $m$ ]   |
| $m_p$         | Massa do carvão atual [ $kg$ ]   |

|                 |   |
|-----------------|---|
| $m_{p,0}$       | Massa do carvão bruto [kg]  |
| $P$             | Pressão local [Pa]  |
| $P_A$           | Pressão atmosférica [Pa]  |
| $p_i$           | Pressão estática [Pa]   |
| $P_{ij}$        | Produção de tensão  |
| $\bar{p}_s$     | Pressão média na superfície da partícula [Pa]   |
| PS              | Corrente primária   |
| $q_{ap}$        | Calor específico absorvido pela partícula [J/kg K]  |
| $q_{cp}$        | Calor por condução do gás para a partícula na unidade de volume de mistura [J]              |
| $q_j$           | Calor específico total por condução na direção $j$ [J/kg K]                                 |
| $q_{s,j}$       | Calor específico através da partícula na direção $j$ [J/kg K]                               |
| $q_{rg}$        | Calor absorvido por radiação pela fase gasosa [J]   |
| R               | Constante do gás perfeito [J/mol K]   |
| $r_p$           | Raio da partícula [m]   |
| $R_p$           | Taxa de massa total do gás adicionado por unidade de volume da mistura [kg/m <sup>3</sup> ] |
| $R_p^{ps}$      | Taxa de queima de um determinado tamanho de partícula por volume de mistura                 |
| S               | Módulo do tensor de deformação  |
| $s$             | Comprimento de caminho percorrido [m]   |
| $\vec{s}$       | Vetor direção [m]   |
| $S_{ik}$        | Tensor de tensões médias  |
| $S_\varepsilon$ | Termo fonte de entrada para a equação da taxa de dissipação                                 |
| $S_k$           | Termo fonte de entrada para a equação de energia cinética                                   |
| $S^{rad}$       | Termo fonte de intensidade de radiação [W/m <sup>2</sup> ]                                  |
| $s_v$           | Taxa de dilatação da partícula por unidade de volume da mistura [m/m <sup>3</sup> ]         |
| SS              | Corrente Secundária   |
| T               | Temperatura absoluta local [K]  |
| $\bar{T}$       | Temperatura média [K]   |
| $T_g$           | Temperatura do gás no infinito [K]  |

|                       |  |
|-----------------------|--|
| $T_p$                 | Temperatura da partícula do carvão [K] (considerada uniforme)                                      |
| $t_Q$                 | Tempo de reação química [s]  |
| $T_{ref}$             | Temperatura de referência igual a 293 [K]  |
| $t_T$                 | Tempo de mistura turbulenta [s]  |
| TS                    | Corrente Terciária   |
| $u_{g,i}$             | Velocidade média do gás em massa apontada para a direção $i$ [m/s]                                 |
| $u_i$                 | Velocidade instantânea na direção $i$ [m/s]  |
| $\bar{u}_i$           | Velocidade média [m/s]   |
| $u_{p,i}$             | Velocidade média da partícula apontada para a direção $i$ [m/s]                                    |
| $u'_i$                | Parâmetro da flutuação da velocidade [m/s]   |
| $u_{p,i}^{ps}$        | Somatório das velocidades das partículas associado a um determinado tamanho [K] da partícula [m/s] |
| $-\overline{u_i u_j}$ | Tensor de Reynolds   |
| $\vec{V}$             | Vetor Velocidade [m/s]   |
| $\dot{w}$             | Velocidade do gás na superfície de controle da partícula [m/s]                                     |
| $Y_k$                 | Dissipação da energia cinética $k$ [J]   |
| $Y_M$                 | Contribuição da compressibilidade turbulenta para a total taxa de dissipação [J]                   |
| $Y_\omega$            | Taxa de dissipação específica, $\omega$  |

## Letras Gregas

|                   |   |
|-------------------|---|
| $\alpha$          | Exponencial igual a 0,75  |
| $\alpha_\epsilon$ | Corresponde aos inversos dos números de Prandtl $\sigma_k$ [-]        |
| $\alpha_k$        | Corresponde aos inversos dos números de Prandtl $\sigma_\epsilon$ [-] |
| $\beta$           | Grandeza Intensiva Independente da Massa                              |
| $\delta_{ij}$     | Delta de Kronecker  |
| E                 | Dissipação turbulenta   |
| $\nu$             | Viscosidade Cinemática [m <sup>2</sup> /s]                            |
| $\nu'_{kl}$       | Coefficiente estequiométrico para os reagentes $I$                    |

|                   |   |
|-------------------|---|
| $\Omega$          | Ângulo sólido   |
| $\Omega_k$        | Rotação rps   |
| $\Omega$          | Taxa de dissipação específica (da energia cinética [K] da turbulência em energia térmica interna) |
| $\rho$            | Massa específica do fluido [ $kg/m^3$ ]   |
| $\rho_g$          | Massa específica da mistura gasosa e partículas (densidade total do gás) [ $kg/m^3$ ]             |
| $\rho_p$          | Massa específica da partícula (fase sólida) [ $kg/m^3$ ]  |
| $\sigma_k$        | Número de Prandtl turbulento para a energia cinética [-]  |
| $\sigma_\epsilon$ | Número de Prandtl turbulento para a taxa de dissipação [-]  |
| $\tau_{def,ij}$   | Tensor das tensões viscosas agindo na partícula devido a taxa de deformação do fluido             |
| $\tau_{ij}$       | Tensor das tensões viscosas   |
| $\mathfrak{I}$    | Segundo invariante do tensor de anisotropia   |

## Siglas

|               |  |
|---------------|--|
| AOA           | Aumento de oxigênio no ar  |
| ASU           | Unidade de Separação de Ar   |
| As            | Arsênio  |
| C             | Carbono  |
| Ca            | Cálcio   |
| $C_A H_B$     | Hidrocarbonetos leves  |
| $C_a H_b O_c$ | Alcatrão ou hidrocarboneto pesado  |
| CEEC          | Custo para Evitar Emissão de $CO_2$  |
| CFD           | Dinâmica dos fluidos Computacional ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> ) |
| CO            | Monóxido de Carbono  |
| $CO_2$        | Gás Carbônico  |
| COE           | Custo da energia   |
| Cr            | Crômio   |
| DFT           | <i>Drop Tube Furnace</i>   |
| DGC           | Dessulfurização de gás de combustão  |

|                  |  |
|------------------|--|
| DOM              | <i>Discrete ordinates method</i>                             |
| DNS              | <i>Direct numerical Simulation</i>                           |
| DPM              | <i>Discrete phase model</i>                                  |
| DT               | <i>Discrete Transfer</i>                                     |
| DTF              | Forno de queda livre   |
| ED               | <i>Eddy dissipation</i>                                      |
| EDFR             | <i>Eddy-dissipation / finite-rate chemistry</i>              |
| FRC              | <i>Finite rate chemistry</i>                                 |
| H <sub>2</sub>   | Hidrogênio   |
| H <sub>2</sub> O | Água   |
| IFRF             | <i>International Flame Research Foundation</i>               |
| LES              | <i>Large eddy simulation</i>                                 |
| LF               | Leito fluidizado   |
| LFC              | Leito fluidizado circulante                                  |
| MC               | Modelo Monte Carlo   |
| N                | Nitrogênio   |
| NO               | Óxido Nítrico  |
| NO <sub>2</sub>  | Dióxido de Azoto   |
| NO <sub>x</sub>  | Óxidos Nitrogenados  |
| N <sub>2</sub> O | Óxido Nitroso  |
| O <sub>2</sub>   | Oxigênio   |
| PDF              | <i>Probability density function</i>                          |
| RANS             | <i>Reynolds Average Navier-Stokes</i>                        |
| RCS              | Redução catalítica seletiva                                  |
| RGE              | Recirculação de gases de exaustão                            |
| RSM              | <i>Reynolds Stress Model</i>                                 |
| RWTH             | Universidade Técnica da Renânia do Norte-Vestfália em Aachen |
| S                | Enxofre  |
| SO <sub>2</sub>  | Dióxido de Enxofre ou Anidrido Sulforoso                     |
| SO <sub>3</sub>  | Trióxido de enxofre ou Óxido Sulfúrico                       |
| SO <sub>x</sub>  | Óxidos de Enxofre  |
| SST              | <i>Shear Stress Transport</i>                                |

|       |   |
|-------|---|
| WSGG  | <i>Weighted-sum-of-gray-gases</i>         |
| UDFs  | <i>User-defined functions</i>             |
| UFRGD | Universidade Federal do Rio Grande do Sul |
| VC    | Volume de Controle                        |
| VM    | Material volátil                          |



## Capítulo 1

# INTRODUÇÃO

### 1.1. Motivações

Com a preocupação crescente do aquecimento global causado pela queima de combustíveis fósseis como carvão mineral, petróleo e gás natural, que liberam gases de exaustão poluentes. Tem-se dado atenção em reduzir a liberação desses gases. Dentre um destes gases está o  $\text{CO}_2$ , que é um gás que tem alta capacidade de absorção da radiação infravermelha. Devido a essa propriedade, o  $\text{CO}_2$  possibilita que apenas uma pequena parte da sua radiação seja liberada para a atmosfera e o restante, a grande maioria, é retida no globo terrestre, ocasionando o efeito estufa.

Assim, o processo de utilização de fontes renováveis tem ganhado grande importância na geração de energia, devido a intenção de redução do efeito estufa. Estas fontes de energias são hídrica, eólica, solar, geotérmica, ondomotriz e biomassa, sendo consideradas não poluentes. O problema está no tempo de implementação e desenvolvimento das fontes renováveis até que elas possam ter uma parcela representativa na produção de energia elétrica. Enquanto isto utiliza-se tecnologias que permitem empregar os combustíveis fósseis com uma significativa redução de emissão de poluente.

Existem três formas de tecnologias de queima, apresentadas na literatura, com potencial de reduzir a emissão de CO<sub>2</sub> para a atmosfera. São elas: pré-combustão, pós-combustão e oxí-combustão. Dentre as três tecnologias citadas de combustão, ainda não há um consenso na literatura de qual a melhor técnica de captura de CO<sub>2</sub> para plantas de grande escala de potência. A dificuldade encontra-se em conhecer o melhor critério para análise das tecnologias. As avaliações podem ser feitas por: eficiência líquida da planta, produção líquida de eletricidade, custo da eletricidade gerada, custo do investimento, eficiência de captura de CO<sub>2</sub>, taxa de emissão de CO<sub>2</sub> [ $gCO_2/kWh$ ] e o custo do CO<sub>2</sub> evitado.

O *International Energy Agency* (IEA) e o *Global CCS Institute* (GCCSI), localizado na Austrália, realizaram a análise das três tecnologias em uma planta de 550 MW<sub>e</sub> que possui uma eficiência de captura de CO<sub>2</sub> de 90%. A análise econômica que se obteve do processo de oxí-combustão pelo IEA e GCCSI foi a redução do custo elétrico, respectivamente, de 7,3 e 8,1 centavos de €/kWh. Na análise da GCCSI relata-se um custo menor de CO<sub>2</sub> evitado, para a oxí-combustão de 30,9 €/t de CO<sub>2</sub>, em comparação com as três tecnologias.

A tecnologia que pode ser aplicada tanto para a obtenção de um aumento da eficiência de combustão como uma maior produção de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O, utilizando tanto combustíveis fósseis ou biocombustíveis é a oxí-combustão. O oxidante do processo é apenas O<sub>2</sub> puro, sendo necessária uma unidade separadora do O<sub>2</sub> do ar, diferentemente do que ocorre com a combustão convencional que utiliza o ar como oxidante. O CO<sub>2</sub> é capturado na forma líquida, pois há uma grande quantidade deste elemento nos gases de exaustão e a outra grande parcela é de água. O CO<sub>2</sub> capturado é recirculado novamente para a entrada do combustor, de modo a evitar as altas temperaturas no combustor. A parcela de CO<sub>2</sub> que não é utilizado para a recirculação é estocada em sedimentos rochosos e áreas petrolíferas já exploradas, evitando assim a sua liberação para a atmosfera. Esta tecnologia é chamada de captura e armazenamento de CO<sub>2</sub>. Além disso, o processo da oxí-combustão tem uma baixa emissão de NO<sub>x</sub>, uma vez que o oxidante é somente o oxigênio e o NO<sub>x</sub> emitido é oriundo do nitrogênio do carvão. O NO<sub>x</sub> é um dos elementos para a formação do ozônio no nível do solo e é responsável pelo aparecimento de câncer nas pessoas e portanto sua emissão deve ser reduzida.

A tecnologia atual de separação do O<sub>2</sub> do ar é a destilação criogênica por ser a mais econômica. Entretanto, ela exige uma alta demanda de energia e penaliza a eficiência global da planta entre 7 a 9%, sendo que a redução máxima da eficiência global foi de 15% em uma planta de 865 MW (ANDERSON E JONHSSON, 2006; TOFTEEGAARD *et al*, 2010). Algumas

alternativas tecnológicas estão sendo estudadas com membrana de transporte de íons, apresentando um grande potencial.

O uso do processo da oxi-combustão, com algumas adaptações do combustor convencional, consegue-se reduzir a emissão de gases do efeito estufa e o NO<sub>x</sub>, pois não tem o processo de NO<sub>x</sub> térmico e imediato. As emissões de NO<sub>x</sub> produzidas na oxi-combustão são reduzidas comparadas ao da combustão convencional.

Os equipamentos básicos necessários para que a oxi-combustão ocorra são o separador de oxigênio, separador de CO<sub>2</sub> e recirculador de CO<sub>2</sub>. Dessa forma, com o enriquecimento de oxigênio no oxidante é maior a eficiência do processo de combustão e, também, produz temperaturas mais elevadas das chamas. A recirculação do CO<sub>2</sub> é feita de forma a reduzir a temperatura do forno.

A adaptação de um queimador convencional para a oxi-combustão necessita de uma quantidade enorme de oxigênio; em uma planta de 500 MW o consumo de oxigênio pode ter cerca de 10.000 t/dia. A demanda de oxigênio para plantas de médio e grande porte pode ser de 3.000 a 10.000 t/dia e a demanda de potência pelos compressores pode atingir de 22 a 82 MW (HUGGINBOTHAM *et al.*, 2011).

O carvão é uma fonte fóssil abundante na natureza e de custo baixo. No Brasil as reservas economicamente aproveitáveis de carvão lavrável são consideradas cerca de 6,6 bilhões de toneladas em 2007, com domínio dos carvões linhito e hulha sub-betuminosa (CANO, T. M., 2009). Perante o mundo, as reservas brasileiras representam 0,8% das reservas mundiais totais. A produção beneficiada de carvão mineral entre os anos de 1995 e 2007, que consiste dos processos que visam a redução da matéria inorgânica existente no carvão, cresceu em média 2%. Os carvões minerais beneficiados brasileiros são: CE 3100, CE 3300, CE 4200, CE 4500, CE 4700, CE 5200, CE 6000, carvão fino e carvão metalúrgico, localizados na região sul do país.

As termoelétricas são instaladas próximo as minas de carvão que tem como medida reduzir o custo de transporte. O Brasil possui as termoelétricas de Jacuí (350 MW), São Jeronimo (20 MW), Charqueada (70 MW), Seival (542 MW), Presidente Medici A (126 MW), Presidente Medici B (320 MW) e Presidente Medici C (350 MW), etc, sendo a potência total instalada de 1.415 MW (ANEEL, 2008).

Essas termoelétricas a carvão emitem muito CO<sub>2</sub> nos gases de exaustão por utilizarem a combustão convencional na queima do carvão. Portanto, o emprego da tecnologia de oxi-

combustão é de grande valia nas termoelétricas. Assim, o objetivo de utilizar o processo de oxi-combustão nas termoelétricas a carvão é de recircular e capturar o CO<sub>2</sub> que seria emitido para a atmosfera, de tal modo reduzindo o aquecimento global. Conseqüentemente, é oportuno analisar a viabilidade térmica da oxi-combustão do carvão nacional na geração termelétrica.

As soluções numéricas em CFD, do inglês Computational Fluid Dynamic, sem dúvida podem ajudar no desenvolvimento e adaptação de combustores de oxi-combustão e seus componentes, com uma redução significativa de seu custo. O processo de combustão de combustível sólido envolve problemas de escoamento de múltiplas fases. E a simulação da oxi-combustão em CFD fornece informação interna do escoamento e complexidade, como a transferência de calor e/ou a reação química durante o processo de combustão.

O presente trabalho realizou um estudo do processo de oxi-combustão do carvão pulverizado nacional, utilizando a simulação numérica em CFD. Pode-se dizer que a utilização industrial do processo de oxi-combustão de carvão mineral pulverizado é uma alternativa totalmente viável e vantajosa para garantir a continuidade da participação desse combustível fóssil na geração termoelétrica. Assim, o estudo foi realizado para apontar a viabilidade técnica, assim como, as oportunidades e barreiras da oxi-combustão do carvão pulverizado para as usinas térmicas com o uso de carvão nacional.

A seleção adequada dos modelos de turbulência, que interagem com a química, e modelos de combustão (para o *char* e materiais voláteis), e processo de desvolatilização têm importância fundamental na simulação numérica do processo de oxi-combustão. Além disso, a reação da gaseificação do *char* deve ser considerada; uma vez que pode levar a resultados incorretos no processo de simulação numérica. A forma de se obter a cinética química da reação é realizar através de experimentos, o que é bastante caro. Portanto, muitos pesquisadores utilizam os que estão disponíveis na literatura adequando ao caso estudado. No presente trabalho utilizou-se a cinética química das reações que estão na literatura.

Neste trabalho, o programa CFD, utilizado foi o ANSYS CFX para se obter as características aerodinâmicas, termoquímicas e fração volumétrica de O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O do processo de oxi-combustão. A formação de poluentes como NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, particulado (cinzas), elementos traço, formação de fuligem na oxi-combustão não fazem parte do objetivo deste trabalho. Entretanto existe um número bastante elevado de pesquisas nesta área.

O modelo de turbulência, de combustão e de radiação, foi primeiramente validado com experimento do carvão pulverizado Rhenish, realizado em um forno de 100 kW, do Instituto de

Transferência de Calor e Massa da Universidade Técnica da Renânia do Norte-Vestfália (RWTH), em Aachen, Alemanha. O primeiro passo foi colocar os modelos de turbulência integrado com o modelo de combustão e de radiação, visando validar os resultados da simulação com os resultados do experimento.

Após a análise de validação da simulação numérica com o experimento, realizados no forno da Universidade de Aachen de 100 kW com o carvão linhito Rhenish, substitui-se o carvão mineral alemão pelo carvão mineral nacional CE 5200, visando analisar se esse carvão mineral nacional tem viabilidade técnica de ser utilizado na tecnologia de oxi-combustão.

## 1.2. Objetivo Geral

Realizar uma análise termoquímica do processo de oxi-combustão do carvão mineral nacional pulverizado, com a ferramenta computacional ANSYS CFX, visando a viabilidade térmica e ambiental do uso deste combustível na geração termoelétrica brasileira.

## 1.3. Objetivos Específicos

Para alcançar o objetivo geral são necessários os seguintes objetivos específicos:

- Investigar os modelos para a turbulência, a combustão (desvolatilização e queima do *char*), a cinética química do carvão e a radiação que melhor reproduz o comportamento da oxi-combustão do carvão mineral pulverizado em ANSYS CFX;
- Selecionar um experimento que fornece os dados necessários para realizar a validação dos modelos utilizados na simulação numérica computacional do processo de oxi-combustão.

## 1.4. Estrutura do Trabalho

No Capítulo 1 apresenta-se a motivação e o objetivo para a concretização da tese, bem como a sua estruturação.

No Capítulo 2 são expostos os trabalhos na área de oxi-combustão de carvão mineral pulverizado de modo a fazer uma revisão bibliográfica da área citada. No primeiro tópico trata-se da parte econômica da oxi-combustão do carvão mineral pulverizado, em que se mostra quais os parâmetros que demonstram a viabilização do processo. Os demais tópicos apresentam os fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos que incidem sobre o processo e quais os modelos utilizados em CFD para garantir uma simulação que se assemelha ao caso real. Por último faz-se a análise do que tem sido feito na área da oxi-combustão com carvão mineral no Brasil.

No Capítulo 3 mostram-se os modelos que podem ser empregados na solução da oxi-combustão do carvão mineral pulverizado para o programa ANSYS CFX. São abordados os principais tipos de modelagem e seus respectivos modelos de turbulência, combustão e radiação para o emprego das simulações do presente trabalho. Além disso, são apresentadas as principais reações químicas, na desvolatilização e reação do *char*, que ocorrem na combustão. Finalmente é apresentada a metodologia que é empregada no ANSYS CFX para a simulação numérica do problema.

No Capítulo 4 consta a apresentação e comentários da escolha da configuração da geometria e da malha numérica do forno cilíndrico de queda livre de 100 kW. Posteriormente valida-se as simulações numéricas com o uso desta malha. Na etapa de validação providencia-se todas as informações disponíveis do experimento realizado com o carvão mineral alemão tipo linhito, denominado Rhenish. A simulação é realizada com a seleção dos modelos de combustão e de radiação de modo a interagir com os melhores modelos selecionados de turbulência. Em todas as etapas descritas anteriormente são analisados os resultados das simulações numéricas com o experimento feito no forno por Toporov *et al.* (2008).

O Capítulo 5 mostra a simulação do carvão mineral nacional denominado CE 5200. Os melhores modelos encontrados na validação do carvão mineral Rhenish foram adaptados e utilizados na simulação do carvão mineral CE 5200. Realizou-se o aporte térmico de modo a garantir a mesma quantidade de energia liberada. Os resultados obtidos do carvão CE 5200 são comparados ao carvão alemão de modo a analisar a viabilidade técnica e ambiental do uso da

tecnologia da oxi-combustão, juntamente com a tecnologia da captura e armazenamento do CO<sub>2</sub>.

O Capítulo 6 exhibe as conclusões adquiridas desta tese e os trabalhos futuros que podem ser desenvolvidos.

## Capítulo 2

# REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo mostra como o assunto da tecnologia da oxi-combustão está sendo abordado na área tecnológica para redução de poluentes. Algumas dessas tecnologias utilizadas são a análise de mudança da fração volumétrica de oxigênio e gás carbônico ( $O_2/CO_2$ ) na entrada dos fornos ou caldeiras, alterações de carvões na queima, adaptação de queimadores e fornos convencionais, etc.

Os trabalhos apresentados, tanto experimentais quanto simulação numérica, mostram as poucas pesquisas nessa área de caracterização do fenômeno e os desafios que envolvem o fato de ser uma combustão com detalhes diferentes da convencional. Dessa forma, para entender melhor o assunto da tese, vários itens são apresentados a respeito da oxi-combustão do carvão mineral. São elas: estudo da oxi-combustão se é viável economicamente, análises feitas em experimentos de laboratórios, comparação dos resultados obtidos de modelos da dinâmica dos fluidos computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) com os experimentos, e a simulação numérica da oxi-combustão no Brasil.



## 2.1. Estudo da Viabilidade Econômica

Xiong *et al.* (2009) realizaram estudo da viabilidade econômica do uso da tecnologia de oxidação em usinas térmicas à carvão na China. Eles compararam essa tecnologia com a combustão convencional alterando dois tipos de plantas de potência com capacidade de 2 x 300 MW e 2 x 600 MW. Foram utilizados dois tipos de carvões, o ShenHua e o HuangShi, com diferentes conteúdos de enxofre. Na análise feita considerou-se quatro condições de operação: (1) planta convencional sem remoção de poluentes, (2) planta convencional com reator de redução catalítica seletiva (RCS) e dessulfurização de gás de combustão (DGC), (3) planta de oxidação sem venda de CO<sub>2</sub> e (4) planta de oxidação com venda de CO<sub>2</sub>. A planta de oxidação não necessita de redutor catalítico seletivo para reduzir a emissão de NO<sub>x</sub> e, usam um dispositivo para remoção de SO<sub>x</sub>.

Com estas condições, os autores verificaram o custo da energia (COE) e o custo para evitar emissão de CO<sub>2</sub> (CEEC), ou seja, quanto é o custo final da energia produzida e quanto custa para recuperar o CO<sub>2</sub> que seria emitido para a atmosfera. Vários parâmetros como custo de investimento anual, custo de venda de CO<sub>2</sub>, custo anual de operação e manutenção, taxa de inflação, energia da unidade de separação de ar (ASU - *Air Separation Unit*), etc., foram utilizados nos cálculos para determinação de custos, COE e CEEC, em diversas condições. Dessa forma, a planta de oxidação tem sua viabilidade quando há a venda de CO<sub>2</sub>, sendo vendido na faixa de 17 – 22 \$/ton (dependendo do caso). O COE da oxidação está correlacionado fortemente com o custo da ASU, que tem a responsabilidade de separar o oxigênio do nitrogênio do ar. Por outro lado, a remodelagem da planta convencional leva a uma redução da potência em 30% quando utilizado a tecnologia da oxidação.

Kakaras *et al.* (2007) analisaram fatores técnico-econômicos comparando as plantas termoelétricas a carvão convencional e as que utilizam a tecnologia da oxidação. O artigo compara o COE com uma planta termoelétrica convencional grega, utilizando o carvão linhito da região. Foi utilizado para os cálculos o programa computacional ENBIPRO que é uma ferramenta que utiliza o balanço de massa e de energia na solução de circuitos termodinâmicos complexos. Para o uso do ENBIPRO, Kakaras *et al.* (2007) utilizaram a usina térmica a carvão convencional grega como referência.

Da planta térmica de referência adicionou-se equipamentos como a ASU, condensador do gás de exaustão, compressores e purificadores de CO<sub>2</sub>, e tratamento de gás de exaustão que

são necessários no processo de oxi-combustão. Fornecidos os dados ao programa de uma planta convencional e para oxi-combustão, obteve-se os resultados dos estados termodinâmicos em cada ponto e consumo de energia de cada componente. Com os resultados fez-se a análise econômica do COE com um prazo *payback* de 40 anos e considerando o fluxo de caixa de desconto, fatores como juros, taxas de depreciação e inflação.

A conclusão que se obtêm, com o uso do carvão linhito grego no processo de oxi-combustão, para a condição que foi analisada, é que o consumo de energia dos equipamentos auxiliares aumenta, assim, a eficiência e a potência líquida se reduzem. Outro fator foi considerado é o custo de evitar CO<sub>2</sub> que é superior a 22 €/t de CO<sub>2</sub>.

## 2.2. Estudos Experimentais

A investigação de Liu *et al.* (2005) sobre a combustão de carvão pulverizado utilizando meios diferentes de combustão foi feita em um *down-fired combustor* de 20 kW. A pulverização do carvão mineral betuminoso britânico foi comparada entre combustão a ar e diversas misturas de O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>. As características que se confrontaram entre os processos são o perfil de temperatura e de composição de gás, combustão do carvão, emissão de CO e conversão de N e S do carvão em NO<sub>x</sub> e SO<sub>x</sub>, respectivamente.

O forno testado possui duas aberturas na zona de combustão, onde na primeira entrada o carvão e o oxidante, sem turbulência, são injetados e na segunda abertura introduz apenas oxidante, com turbulência. Por último existem portas após a combustão que servem para a redução do NO<sub>x</sub>, conforme Figura 2.1.

Os resultados obtidos com o experimento mostraram que o acréscimo de CO<sub>2</sub> no ar reduz a temperatura do gás. Logo, a concentração de O<sub>2</sub> na mistura O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> deve ser maior que 30% para que o perfil de temperatura seja igual ao da combustão com ar. Nos experimentos, utilizou-se a concentração de 30% O<sub>2</sub>/ 70% CO<sub>2</sub>. Com isso, se obteve uma menor conversão de N do carvão em NO<sub>x</sub>, uma melhor combustão e uma menor emissão de CO comparado a combustão com ar. Além disso, se for utilizada a terceira porta com entrada de oxidante, tem-se uma redução da emissão de NO<sub>x</sub> para os dois modos de combustão a ar e mistura de O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>.

Uma outra informação obtida dos experimentos, é que o  $\text{SO}_x$  não tem interferência com a forma de queima.

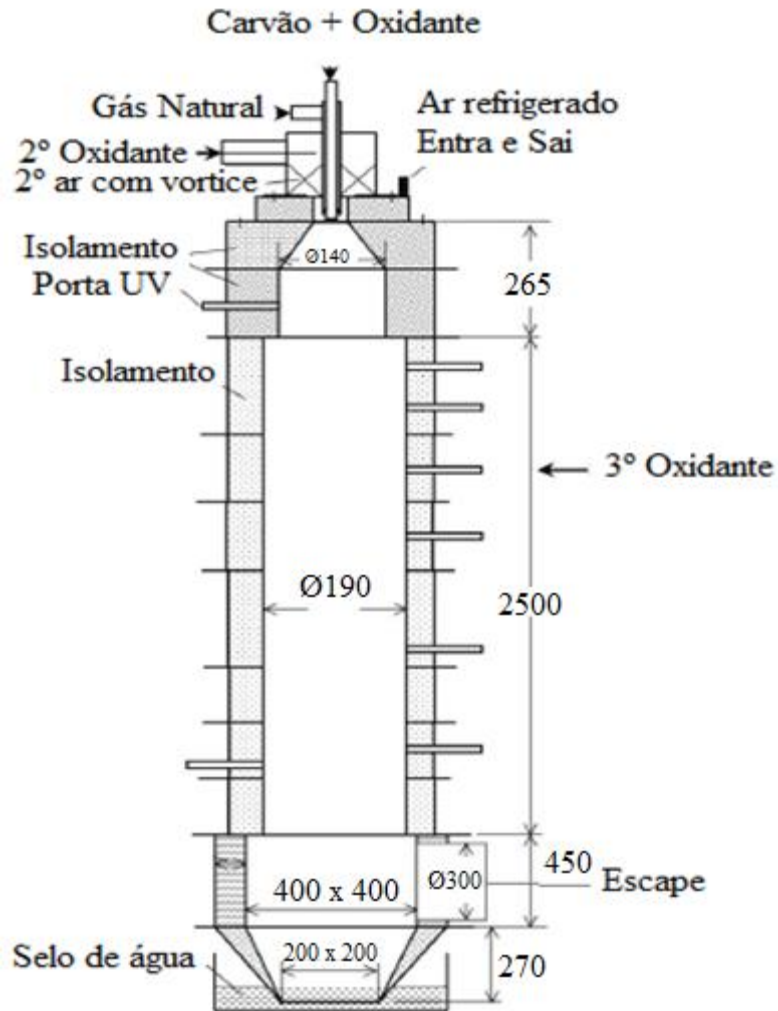


Figura 2.1 - Desenho esquemático do combustor de carvão de 20 kW (LIU *et al.* 2005).

Tan *et al.* (2006) utilizaram a instalação da câmara de combustão vertical, localizado no Centro de Tecnologia de Energia (CANMET), Canadá, para realizar experimentos com três tipos diferentes de carvão mineral que são mais utilizados no país. Os tipos de carvões são betuminoso oriental, sub-betuminoso e linhito. Realizaram-se investigações das características destes carvões utilizando a tecnologia de oxi-combustão. As obtenções dos dados foram feitas através do monitoramento da composição dos gases de exaustão ( $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}$  e  $\text{NO}_2$ ) e pela utilização de pirômetro de sucção e medidores de altas temperaturas.

Os resultados obtidos com os experimentos tiveram as seguintes conclusões: com relação ao  $\text{SO}_x$ , observou-se, que se não houver remoção do  $\text{SO}_2$  nos gases de exaustão antes da recirculação do mesmo, proporcionará uma acumulação de  $\text{SO}_3$ , o qual eleva a taxa de corrosão. Também se constatou que para haver redução de  $\text{NO}_x$  é necessário que a câmara de combustão seja reformulada para a redução deste poluente e, com a utilização de  $\text{O}_2$ , é possível se obter um volume de gás menor e, conseqüentemente desenvolver um sistema de gerador de vapor mais compacto.

Duan *et al.* (2011) pesquisaram os efeitos de oxidantes atmosféricos e de  $\text{O}_2$  separados do ar em um combustor de leito fluidizado circulante (LFC) de 50 kW. A análise foi feita em um combustor LFC por não necessitar de um novo projeto e/ou remodelagem do combustor, quando se altera a combustão convencional para a injeção de oxigênio separado do ar. O combustor também traz algumas vantagens quando se trabalha com oxi-combustão, combustível flexível, forno de dessulfurização econômico, baixa emissão de  $\text{NO}_x$ , etc.

Duan *et al.* (2011) compararam dois tipos de carvões (antracito e betuminoso) nos seus experimentos. Os resultados adquiridos com os experimentos realizados com o aumento da concentração de  $\text{O}_2$  na queima, aumenta a eficiência da combustão, a emissão de  $\text{NO}$  e  $\text{SO}_2$ , e diminui a emissão de  $\text{CO}$ . Também foi constatado com o aumento da concentração de  $\text{O}_2$  tem-se uma melhor eficiência de dessulfurização para uma mesma razão molar de  $\text{Ca/S}$ , no processo químico catalítico de remoção de enxofre do carvão. Em outro ensaio realizado, analisou-se o que ocorre quando se aumenta a concentração de  $\text{O}_2$ . Com a obtenção de melhorias da eficiência de combustão, da dessulfurização, e redução da emissão de  $\text{NO}$ . A última característica analisada, deve-se a maior concentração de  $\text{CO}_2$  no processo de oxi-combustão do que a combustão convencional, aumentando-se assim a reação  $\text{NO/CO/char}$ .

Czakiert *et al.* (2010) realizaram um experimento em uma planta de escala piloto de 0,1  $\text{MW}_{\text{th}}$ . O combustor de 0,1  $\text{MW}_{\text{th}}$  é do tipo LFC com algumas adaptações para a utilização do carvão betuminoso na oxi-combustão. Os dados adquiridos para análise foram temperatura, pressão, diferença de pressão, amostras de gases de exaustão, cinzas de fundo e volantes, material circulante. Os métodos utilizados na medição de amostras de gases de combustão foi o infravermelho para obtenção de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{SO}_2$  e  $\text{NO}_x$ , e paramagnético para  $\text{O}_2$ .

A análise dos resultados são a conversão de N, S e C do carvão em  $\text{NO}_x$ ,  $\text{SO}_2$  e  $\text{CO}$ , respectivamente, para o caso de oxi-combustão e combustão convencional (dado de referência para a análise). Os resultados obtidos foram a razão de conversão de cada substância em função

da temperatura, concentração de  $O_2$  e excesso de  $O_2$ . Com base nos resultados, conclui-se que com o aumento da concentração de  $O_2$  aumenta-se a temperatura de combustão, que a oxi-combustão permite uma melhor combustão completa (menor emissão de CO), além do aumento da conversão de S para  $SO_3$  (causador da corrosão) e o excesso de  $O_2$  na zona de reação, fator crucial para a formação de  $NO_x$ .

A proposta de Li *et al.* (2014) foi de examinar as características de combustão e emissão de três diferentes ambientes de queima do carvão: oxigênio e nitrogênio ( $O_2/N_2$ ), oxigênio e gás carbônico ( $O_2/CO_2$ ) e  $O_2$  com recirculação de gases de exaustão ( $O_2/RGE$ ). Todas para altas concentrações de entrada de  $O_2$  (46,4 até 54,6%), advindos da unidade de separação de ar (ASU - *Air Separation Unit*) e do tanque de oxigênio líquido. Os experimentos foram realizados em uma planta térmica a carvão com LFC de 0,1 MW, remodelado para uso de RGE. O experimento foi realizado com o forno na temperatura média de 850 °C e velocidade de escoamento de 3,85 até 4,47 m/s.

Assim, com as medidas realizadas nos experimentos, notou-se o aumento na razão Ca/S para todos os casos, além do aumento na eficiência de captura do enxofre. Porém, na operação com  $O_2/RGE$  observou-se que a utilização do calcário tem uma redução da eficiência de dessulfurização em comparação a  $O_2/N_2$  e  $O_2/CO_2$ . Em contrapartida, o modelo  $O_2/RGE$  se encontra numa faixa de concentração de conversão de N em NO bem menor do que nos modelos de  $O_2/N_2$  e  $O_2/CO_2$ . A última análise foi com relação ao comportamento da concentração de  $O_2$  no gás de exaustão quando se trabalha com  $O_2/RGE$ , nesta situação o aumento de  $O_2$  causa redução na concentração de CO.

Roy e Bhattacharya (2014) fizeram experimentos em escala de laboratório da oxi-combustão em leito fluidizado (LF) do carvão linhito, mais especificamente o carvão Victorian encontrado na Austrália. O artigo apresenta investigações do comportamento do carvão em diferentes condições de operação e são comparados com a combustão convencional.

Os resultados mostraram que a concentração de  $CO_2$  nos gases de escape cresce com o aumento de  $O_2$  e com adição de vapor de água no oxidante. Outro resultado é com relação ao aumento da temperatura na oxi-combustão e aumento da fração volumétrica de  $CO_2$  nos gases de exaustão. Também, avaliaram-se amostras de cinzas para a determinação de elementos vestigiais como arsênio (As), crômio (Cr) e selênio (Se), que são observados na Tabela 2.1 a composição destes elementos no carvão mineral, nocivos à saúde humana, na fase gasosa. Nas condições estabelecidas, com o aumento da concentração de  $O_2$ , na oxi-combustão, observaram

um aumento de As e Cr na fase sólida e redução de Se nas cinzas. Porém, adicionando o vapor de água ao oxidante, os elementos vestigiais são encontrados em menor quantidade na cinza.

Tabela 2.1 – Composição dos oligoelementos do carvão Yallourn utilizado no experimento (ROY e BHATTACHARYA, 2014).

| Elemento | mg/kg base seca do carvão |
|----------|---------------------------|
| Cr       | 80,0                      |
| As       | 48,0                      |
| Se       | 19,0                      |

O experimento realizado por Duan *et al.* (2014) teve como objetivo analisar o comportamento do regime de transição, da combustão em ar para oxigênio, e a emissão de SO<sub>2</sub> e NO em regime permanente, em um combustor de LFC de 50 kW, com aquecimento da recirculação dos gases de exaustão, de modo a garantir temperaturas acima do ponto de orvalho. Nos testes realizados foram utilizados os carvões betuminoso americano e o betuminoso chinês, e o *char* de petróleo chinês, para a combustão convencional e a oxi-combustão com reaquecimento dos RGE.

O primeiro resultado obtido é que na mudança do modo de processo convencional para oxi-combustão requer menos esforço para o LFC do que para o combustor pulverizado, isto é, devido à grande quantidade de material inerte no LFC. No caso do SO<sub>2</sub>, os dados coletados mostraram que a concentração de SO<sub>2</sub> é maior para o modo de oxi-combustão, porém este modo permite uma razão de Ca/S maior e assim uma dessulfurização mais eficiente, com isso emite menos SO<sub>2</sub> do que a combustão convencional. Por último, a emissão de NO foi reduzida na oxi-combustão com o aquecimento provocado pela recirculação do CO<sub>2</sub>. Essa redução de NO está associada com a quantidade de volátil do carvão; quanto mais voláteis, maior é a redução de emissão de NO.

## 2.3. Estudos Experimentais com Análise em CFD

Wall *et al.* (2009) analisaram a diferença entre oxi-combustão e combustão convencional de três diferentes carvões australianos em um forno de queda livre (DTF – *drop tube furnace*) de escala laboratorial e piloto. Compararam os resultados experimentais com modelos usados em CFD. Fez-se o experimento e posteriormente a modelagem em CFD da oxi-combustão pois, na literatura não há quantidade suficiente de dados de medição para fornos empregando oxi-combustão. Por este motivo, a oxi-combustão é comparada com a combustão convencional para serem feitas as devidas análises de vantagens e desvantagens entre as duas maneiras de combustão.

Os resultados dos experimentos foram realizados para a recirculação úmida e seca, ou seja, com ou sem recirculação do vapor de água, respectivamente. Determinou-se nos dois casos as temperaturas de chama adiabáticas, considerando a mesma concentração de oxigênio e menor carbono nas cinzas na oxi-combustão em relação a combustão convencional.

No caso de estudar a geometria do queimador, o efeito de escoamento multifásico na combustão do carvão e a transferência de calor no forno, utilizou-se o ANSYS FLUENT para simular situações de combustão convencional e oxi-combustão. O resultado mostra um atraso de ignição da chama na oxi-combustão.

Implementou-se o modelo WSGG com *4-gray-gas*, no qual é previsto a emissividade do forno que realiza o processo de oxi-combustão. Nesse modelo, observou-se um aumento de emissividade na oxi-combustão. Com relação a emissão de partículas no processo de oxi-combustão houve redução de  $\text{NO}_x$  e  $\text{SO}_2$  enquanto que  $\text{SO}_3$  aumentou.

Chui *et al.* (2003) compararam resultados experimentais de oxi-combustão do carvão sub-betuminoso canadense com os resultados numéricos em CFD. A oxi-combustão foi feita de duas formas, com aumento de oxigênio no ar (AOA) e, também por recirculação de gases de exaustão (RGE). Foi utilizado o combustor em escala piloto de 0,3  $\text{MW}_{\text{th}}$  de CANMET na realização do experimento. A RGE foi ensaiada com dois tipos de queimadores. A principal diferença dos queimadores ensaiados é com relação a localização da corrente de oxigênio puro, sendo uma dentro e outro fora da corrente do gás primário. No caso de AOA foi ensaiado apenas no combustor; no qual o oxigênio puro é interno a corrente primária.

Analisando o resultado adquirido no experimento do AOA, que na região central do forno houve um aumento da temperatura e de  $\text{NO}_x$  térmico, devido a condição de alta

concentração de  $O_2$  e nitrogênio do ar. Existe um crescimento da emissão de  $NO_x$  térmico na oxidação de AOA em comparação com a queima convencional. Já no caso da RGE utilizou-se o mesmo combustor que o AOA e, observou-se que há diferença na quantidade emitida de  $NO_x$ , quando há alteração do vórtice (*swirl*). Quanto mais forte o *swirl*, menor  $NO_x$  emitido devido ao maior espalhamento das partículas do carvão. No outro experimento, um combustor diferente foi usado para a RGE. A corrente de  $O_2$  é injetada fora da corrente primária, observando pouca alteração na emissão de  $NO_x$ , ou seja, a configuração do combustor para o caso deste carvão, não é um parâmetro para alteração do  $NO_x$ .

No caso da simulação numérica do experimento descrito acima, foi executado pela versão beta do programa comercial CFX-TASCflow, que forneceu os seguintes modelos para descrever o problema. No modelo de turbulência utilizou-se  $k-\epsilon$  no cálculo do escoamento. Na desvolatilização foi utilizado o modelo *first order single reaction*. Empregou-se o modelo *eddy-breakup* para a combustão de voláteis. Na combustão do *char* empregou-se o governo da taxa de cinética química e a taxa de difusão externa de oxigênio na superfície do *char*. O cálculo da formação de  $NO_x$  é obtido através da oxidação do nitrogênio ligado ao carvão, produzido por chama turbulenta e, é modelado pelo conceito de *eddy-dissipation*. O modelo *probability density function* (pdf) foi empregado para a determinação da oxidação molecular do nitrogênio ( $NO$  térmico e imediato) e na redução heterogênea de  $NO$  pelo *char*.

Na comparação dos resultados experimentais com os modelos selecionados em CFX, têm-se a temperatura e as concentrações de  $CO$ ,  $O_2$  e  $NO$  razoavelmente precisas para variação de *swirl* e configuração do queimador. Dessa forma o CFD pode fornecer resultados das características da chama e  $NO_x$  em regiões que são de difícil acesso na obtenção de dados experimentais.

No trabalho subsequente, Chui *et al.* (2004), após ser validado o modelo para os combustores convencionais aplicado a oxidação, quiseram obter uma melhor configuração de forno e combustor. Dessa forma, foi desenvolvido em CFD, com os modelos empregados por Chui *et al.* (2003), dois projetos de queimadores (C1 e C2) para oxidação e, antes de ser realizada a sua fabricação, que tivesse adequado perfil de chama, baixa concentração de  $CO_2$  na região central da seção transversal do combustor e, baixas emissões de  $NO_x$  e  $CO$ .

O queimador C1 teve como base o combustor B do artigo de Chui *et al.* (2003), como mostrado na Figura 2.2. Os resultados obtidos para C1 mostraram uma chama mais



axissimétrica, mistura rica no centro, evitando dessa forma que a desvolatilização do carvão se transforme em NO. A quantidade de CO no forno, obtido através do queimador C1, foi menor, ou seja, houve uma melhor mistura do oxidante com o combustível no forno.

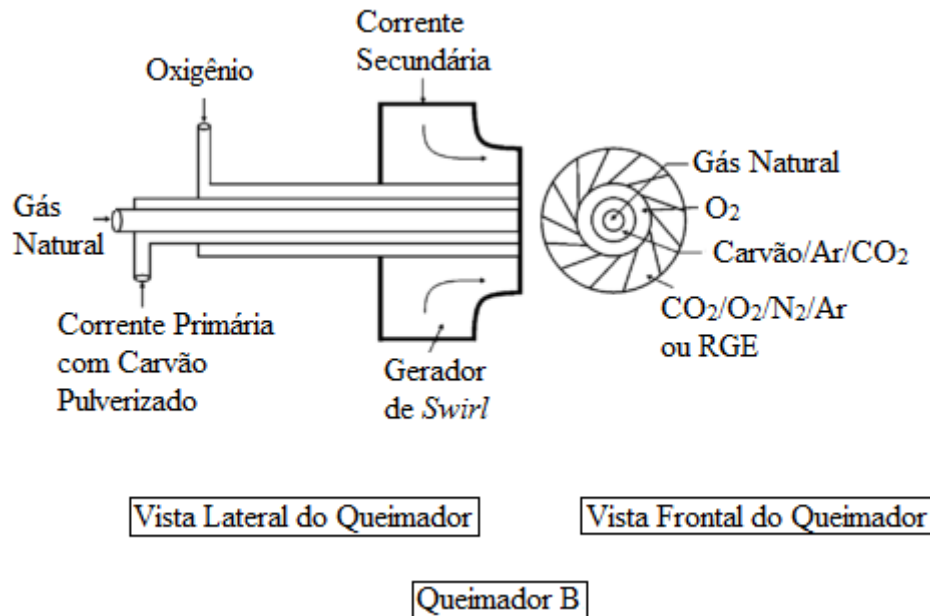


Figura 2.2 – Esquema da configuração do combustor B de CANMET, modificado de Chui *et al.* (2004)

Porém, para verificar os efeitos minimizados na parede criados pela chama, o combustor de 0,61 [m] de diâmetro foi elaborado um forno de largura maior na entrada, de diâmetro 1 até 1,2 [m] a jusante do forno, retornando a largura de 0,61 [m] até a saída do forno. Simulou-se o queimador C1 neste novo forno e, obteve-se característica de chama indesejável para este tipo de forno. O combustor C1 foi modificado para se obter um queimador C2. Assim, comparando C2 com C1 notou-se que o perfil de temperatura de C2 foi mais uniforme, tendo uma melhor mistura, assim um CO mais baixo. Porém, a emissão de NO para o caso de C2 é maior que C1 para este forno mais largo na entrada.

No final da simulação numérica dos queimadores C1 e C2, remodelou-se o forno e fabricou-se o queimador C2 por ter melhor estabilidade de chama. O primeiro experimento, com os mesmos dados de entrada, daqueles utilizados em CFD, obteve resultados similares. Foi observado o auxílio do CFD para se projetar um combustor e queimador na intenção de adquirir resultados melhores do processo de oxi-combustão de carvão.

Zhou *et al.* (2013) utilizaram no seu trabalho equações que governam o modelo Euler-Euler para simular numericamente a oxi-combustão em LFC de 50 kW<sub>th</sub>, pois é usado para

partículas que estão dispersas em uma fase fluida contínua (fase primária). As equações da conservação da massa, *momentum* e energia foram aplicadas para as fases gasosa e sólida que ocorrem na combustão. Foram considerados os modelos de reação química, evaporação da umidade, desvolatilização do carvão, combustão dos voláteis, combustão do *char*, gaseificação do *char*, formação de NO e SO<sub>2</sub> e a retenção direta e indireta do SO<sub>2</sub>. A simulação numérica foi realizada na plataforma ANSYS FLUENT 12.

Os modelos numéricos empregados foram validados com os dados experimentais para a combustão em ar e 30% O<sub>2</sub>/70% CO<sub>2</sub>, no qual dois casos foram admitidos. O primeiro caso analisado manteve a mesma taxa de alimentação do carvão e, o segundo manteve a mesma vazão volumétrica do oxidante. Após a validação do modelo numérico, investigou-se o que ocorre com as características do escoamento sólido-gasoso, transferência de calor, combustão de carvão e emissão de poluentes para diferentes modos de combustão (O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>/RGE) com diferentes concentrações de O<sub>2</sub>, 21%, 25%, 30% e 41%.

No primeiro estudo, com a taxa de alimentação de carvão constante, o volume de oxidante diminui à medida que aumenta a concentração de O<sub>2</sub>, no forno. Isso proporciona uma recirculação menor de gases de exaustão e uma temperatura maior na zona de diluição. Outro fato é que a concentração de CO<sub>2</sub> tanto na recirculação de O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> quanto O<sub>2</sub>/RGE aumenta comparados à combustão convencional. A concentração de NO e SO<sub>2</sub> neste caso do experimento foi maior, porém a emissão de poluentes para a atmosfera ficou menor.

No segundo caso estudado, quando é mantido a vazão volumétrica do oxidante constante à medida que aumenta a concentração de O<sub>2</sub> de 21% para 35%, a taxa de alimentação de carvão eleva-se. Isto proporciona uma maior fração de volume sólido na zona de diluição e um perfil da temperatura mais uniforme. Neste caso, tem-se um aumento da concentração de CO<sub>2</sub> nos gases de exaustão. A concentração de NO e SO<sub>2</sub> foi menor, porém a emissão desses poluentes para a atmosfera é maior.

Os modelos numéricos tiveram uma boa concordância com os experimentos realizados nos seguintes itens: perfil de temperatura, pressão e concentrações de saída dos gases de exaustão. Porém, erros elevados na emissão de NO e SO<sub>2</sub> foram encontrados entre os dados experimentais e simulados. Isto está relacionado ao fato de que se utilizou apenas um diâmetro de partícula na simulação dos modelos de emissão.

O propósito do trabalho desenvolvido por Zhang *et al.* (2013) foi de promover a compreensão dos detalhes que sustentam as características da combustão do carvão Victorian

Brown, carvão linhito. Estas observações foram feitas em escala laboratorial em um forno de queda livre (DTF) para combustão em  $O_2/N_2$  e  $O_2/CO_2$  com misturas de  $O_2$  entre 21 - 30%, e comparados com o modelo numérico desenvolvido.

Na simulação numérica, modelado no pacote comercial ANSYS FLUENT, utilizou-se o modelo de escoamento turbulento k- $\epsilon$  e para a trajetória da partícula foi empregado o *discrete phase model* (DPM). Na radiação utilizou-se dois sub-modelos, o modelo *discrete ordinates* (DOM) foi aplicado, no qual o corpo foi assumido ser um corpo cinza, enquanto no seu aprimoramento utilizou-se o modelo WSGGM (*weighted-sum-of-gray-gases model*). Considerou-se para efeito de cálculo que 10% da umidade no carvão é liberado com o material volátil. O processo de desvolatilização foi determinado pelo *first order model* e a taxa de combustão dos voláteis foi simplificada, modelado como a taxa de oxidação do metano, assim implementando o mecanismo de dois passos de WestBrook e Dryer. Na reação dos gases homogêneos empregou-se o modelo *finite-rate/eddy-dissipation* (FR-ED).

Os resultados obtidos por simulação numérica foram comparados às medições experimentais. Algumas das observações, tanto do modelo como do experimento são que a oxidação do carvão na oxi-combustão ocorre em menos de 0,6 [m] de distância da entrada do injetor. A máxima temperatura da partícula encontrado na simulação numérica está entre 1300 a 1600 [K]. Nas temperaturas do forno de 1073 [K] e 1273 [K], a reação de gaseificação do *char* contribuiu de 10 a 25%. O atraso da ignição entre queima em ar e oxigênio é reduzido com o aumento da temperatura do gás secundário. A conclusão final do trabalho realizado é de que o fluxo de calor por radiação na oxi-combustão é similar a combustão convencional, quando substitui-se ar por 27% de  $O_2/CO_2$ .

## 2.4. Simulação de Oxi-Combustão em CFD

Edge *et al.* (2011a) apresentaram a simulação numérica com o uso do modelo *Large Eddy Simulation* (LES) em CFD, no qual simularam-se a combustão pulverizada convencional e, oxi-combustão, em uma instalação de 0,5 MW<sub>th</sub>. As simulações foram efetivadas em três casos. No primeiro caso foi utilizado o queimador de 3 estágios com baixo NO<sub>x</sub> e um tipo de carvão betuminoso. Nos demais casos, 2 e 3 foram usados um queimador da *International*

*Flame Research Foundation* (IFRF) e um tipo diferente do primeiro caso de carvão betuminoso. O processo de oxi-combustão do carvão somente foi realizado no caso 3, sendo dois primeiros casos feitos pela combustão convencional. As simulações numéricas foram realizadas com o modelo de turbulência k- $\epsilon$  RNG e as demais com o modelo k- $\epsilon$  padrão. Os resultados do modelo LES foram comparados com *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) e com medições experimentais disponíveis.

O modelo *standard Smagorinsky* para cálculo da viscosidade e a aproximação dinâmica de Lilly são usados em escoamento compressíveis. Na combustão dos voláteis o modelo de *eddy dissipation* é utilizado, e para a combustão do *char* é baseado no submodelo de *Smith's intrinsic model*. Para todos os casos investigados, no processo de radiação, o modelo empregado foi o WSGGM acoplado com o DOM. O método de radiação não cinzento foi considerado de forma ao manipular a natureza espectral de absorção e emissão dos produtos da oxi-combustão.

Os resultados indicaram que o modelo LES obtém uma melhor simulação da zona de recirculação e configuração da chama, além de demonstrar a importância das propriedades radiativas do gás. Na comparação dos valores de temperatura de saída do combustor obtidos pelas metodologias LES, RANS e com o dado experimental, observa-se que os resultados obtidos por LES é o que mais aproximou-se dos dados experimentais. O modelo LES ainda tem que ser aperfeiçoado na determinação da emissão de CO e NO<sub>x</sub>.

Warzecha e Boguslawski (2014b) compararam os modelos de turbulência LES e RANS com um experimento feito em um queimador com gerador de vórtice (*swirler*). Os dois modelos foram efetuados para combustão convencional, para ter um valor como base, e posteriormente foi efetuado misturas de O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> de 21, 30 e 35%.

A simulação numérica foi feita usando o programa comercial ANSYS FLUENT. No caso da simulação RANS foram usados o *solver* 2D axissimétrico junto com o modelo de turbulência k- $\epsilon$ . Na análise empregando LES utilizou a geometria 3D com o mesmo modelo de turbulência utilizado para RANS. Nos dois casos utilizou-se na interação química-turbulência o modelo *finite-rate/eddy-dissipation* (FR-ED). O modelo *single rate devolatilization* foi utilizado para simular a desvolatilização do carvão. Na fonte de radiação foi empregado DOM, modelo radioativo, e WSGGM para prever a emissividade.

Da simulação numérica para a oxi-combustão do carvão, o método LES mostra ter uma melhor definição do campo de temperatura, por haver uma maior uniformidade da temperatura ao longo do combustor, ou seja, adequa-se melhor a resultados reais comparado ao método

RANS, que possui duas zonas de temperaturas. Porém, os dois métodos apresentam resultados semelhantes para o campo de temperatura no caso da recirculação de 30% O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> ao da combustão convencional. No campo de velocidade observou-se que os dois métodos se diferenciam na zona de recirculação do escoamento, apresentando similaridade de valores fora dessa região.

O artigo de Warzecha e Boguslawski (2014a) apresentaram resultados da simulação numérica do processo de combustão do carvão pulverizado em um queimador com gerador de vórtices, usando métodos RANS e LES para escoamento turbulento. As simulações numéricas foram feitas no Instituto de Transferência de Massa e Calor na *RWTH Aachen University*, Alemanha. Warzecha e Boguslawski (2014a) fizeram uma análise detalhada do campo de escoamento na câmara de combustão para escoamento a frio e em regime turbulento. Os modelos utilizados para a simulação computacional são os mesmos de Warzecha e Boguslawski (2014b)

Os resultados puderam ser validados com dados experimentais e numéricos de outros grupos de pesquisas. A investigação detalhada foi feita para verificar a influência do oxidante, mecanismo de reação e métodos de solução de turbulência nos resultados. Embora o método RANS prevê muito bem a recirculação, foi observado que o método LES determina uma área maior da zona de recirculação e da recirculação externa. Outra observação foi que a temperatura de saída dos gases pelo método LES foi menor que o RANS devido ao total consumo de oxigênio na reação. Estes fatos levaram o método LES (entre os casos estudados) a um valor mais preciso do dado experimental.

Hu e Yan (2013) investigaram utilizando simulação numérica, através do ANSYS FLUENT, o efeito dos modelos de coeficiente de absorção e a intensidade de radiação em oxidação do carvão com RGE. A análise possui como parâmetros a relação entre a razão de RGE e a concentração de O<sub>2</sub> em várias condições. Foi utilizado para o estudo da intensidade radiativa nas paredes laterais os resultados baseados em uma instalação de 0,5 MW da *RWE npower*, Reino Unido.

Os modelos empregados na simulação numérica para o problema 2D axissimétrico, foram: na fase discreta (partículas do carvão) o modelo de aproximação de Euleriano-Lagrangiano; o algoritmo SIMPLE, para acoplar a velocidade e pressão; o modelo k-ε, para o escoamento turbulento nas equações de RANS; utilizou-se na combustão de volátil o modelo *finite-rate/ eddy-dissipation* (FR-ED); o modelo de combustão de *char* emprega a taxa de

cinética química e a taxa de difusão externa; DOM e dois modelos, WSGGM-Yin e WSGGM-Smith, são utilizados para representar a radiação, no qual as suas implementações são feitas via *user-defined functions* (UDFs).

O resultado adquirido pelo modelo de WSGGM-Yin demonstrou uma precisão adequada da intensidade radiativa, enquanto que o modelo WSGGM-Smith subestimou os valores. Outra decorrência observada é que o aumento da intensidade radiativa aumenta com a concentração de  $O_2$  ou decréscimo da razão de RGE. O valor ideal para remodelagem de combustores convencionais está na faixa de 29 a 32% da concentração de  $O_2$ . Assim notou-se que o pico de temperatura se aproxima do injetor.

No trabalho estudado por Al-Abbas *et al.* (2011) possui quatro casos em CFD de oxidação de pulverizado de linhito seco. Os quatro casos analisados foram: a combustão convencional e a oxidação com fração volumétrica de  $O_2$  de 25%, 27% e 29%. A validação foi feita com experimento realizado, em escala laboratorial, no forno de 100 kW da Universidade de Chalmers, Suécia.

Foram empregados para a simulação numérica do escoamento de duas fases, sólido-gasoso, a aproximação de Euleriano-Lagrangiano. No modelo da fase gasosa as equações foram descritas por equações diferenciais parciais eulerianas. Na fase de partículas (Lagrangiana) o modelo usado foi o *Discrete Droplet Method* (DDM). Na simulação da combustão da fase gasosa se empregou o modelo *eddy breakup* (EBU) para a combustão de turbulência controlada. Na condição da combustão de partículas foi empregado o modelo de Badzioch e Hawksley e reação global de ordem unitária, para a desvolatilização e combustão do *char*, respectivamente. No caso da turbulência o modelo k- $\epsilon$  foi usado.

O resultado numérico apresenta uma boa concordância com relação aos valores medidos em termos do perfil de temperatura e concentrações das espécies nas principais localizações do forno. Do resultado numérico obteve-se o perfil de temperatura de chama e concentração de  $O_2$ ; no caso 25%, é semelhante ao caso da combustão convencional. Enquanto que em 27% e 29%, a chama depara com um aumento da temperatura e uma estrutura de chama mais curta. Outra constatação, foi que a utilização do mecanismo de reação química de 1 passo superestimou o conteúdo da mistura na zona envolvente da chama (*flame enveloped zone*). Porém, o estudo fornece dados confiáveis para as condições de oxidação do carvão.

Krzywański *et al.* (2011) apresentaram um modelo matemático para a combustão em ar ou oxigênio, enriquecida para ambientes que envolvem combustor e LFC. Foi criado um

programa computacional para calcular as emissões de CO<sub>2</sub>, CO, SO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> e NO<sub>x</sub>, no qual foi validado com as medições da instalação de 0,1 MW<sub>th</sub> em que o LFC encontra-se em regime de oxi-combustão. O programa foi feito a partir de um já existente que combina fundamentos de conservação de massa e energia, com correlações empíricas e 34 reações químicas.

Dessa forma, a proposta do estudo foi de adicionar mudanças nas equações de cinéticas química, sendo incluídas onze reações. Das reações, foram analisadas sensitivamente quais delas possuíam influência nos componentes dos gases de exaustão.

A conclusão que os autores obtiveram é que apenas duas das reações tem grande influência na emissão de CO e NO<sub>x</sub> e que 90% do N<sub>2</sub>O e NO<sub>x</sub> formado no leito fluidizado circulante, é advindo do elemento nitrogênio ligado ao carvão. No programa, para efetuar os cálculos, utilizou-se a aplicação da área de superfície de reação do *char* na equação. Com isso, os novos modelos de emissões dos valores calculados foram comparados com as medidas experimentais e obteve-se um desvio de no máximo de 20%.

Kangwanpongpan (2013) estudou os modelos matemáticos na condição da oxi-combustão do carvão linhito alemão, denominado Rhenish, e também foram criados novas correlações para o modelo WSGG ao predizer as propriedades radiativas da oxi-mistura gasosa entre partículas de carvão e gases. Os modelos matemáticos foram estudados com o auxílio do ANSYS FLUENT que preveem aerodinâmica, termoquímica e transferência de calor. A validação dos modelos foi efetivada com dois conjuntos de dados experimentais. Os primeiros dados do experimento adquiridos para temperatura, intensidade de incidência hemi-esférica e concentração de espécie (O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) de um forno de 0,4 MW<sub>th</sub>, em *Brandenburg University of Technology*, Cottbus, Alemanha, e os demais dados de velocidade, temperatura e concentração de O<sub>2</sub> advindos de um forno 100 kW, realizado por Toporov *et al.* (2008) na Universidade de Aachen, Alemanha.

Realizou-se uma simulação na placa infinitesimal unidimensional com nova correlação do modelo de radiação de propriedades dos gases em que se providencia um melhor resultado comparado à base de dados HITEMP 2010. Erros relativos de 30% para fluxo de calor, emitido por radiação, e 15% para termos fontes de radiação. Os resultados de simulação numérica para a oxi-combustão do forno de 100 kW<sub>th</sub> foram similares ao experimento. Assim, os modelos que foram validados no forno de escala laboratorial aplicam-se na simulação numérica do forno de 0,4 MW<sub>th</sub> e obteve-se bons resultados comparados aos experimentos (temperatura, concentração de gás e quantidade de radiação).

## 2.5. Simulação Numérica no Brasil com ou sem Oxi-Combustão

Da Silva *et al.* (2010) utilizaram do programa computacional ANSYS CFX com o objetivo de simular a combustão convencional do carvão mineral pulverizado em uma planta termoelétrica de 160 MW<sub>e</sub>, localizado na região brasileira de reserva de carvão. Estudou-se as condições de operação, além de identificar fatores que induzem a eficiência da caldeira neste estado. A planta termoelétrica opera sobre um ciclo subcrítico contendo uma caldeira a vapor superaquecido. Os modelos empregados no CFX para a simulação do caso foram: turbulência  $k-\omega$ , *discrete transfer radiation model*, *eddy break-up Arrhenius* (reação química), reação de Arrhenius de dois passos (modelo de desvolatilização) e Field Char Oxidation (reação do *char*).

Os parâmetros que se analisaram entre a simulação numérica e o experimento são a taxa de transferência de calor, temperatura de saída, concentrações de O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO e NO<sub>x</sub>. Destas propriedades, as que se mostraram fora do processo de combustão do experimento foram as concentrações de CO<sub>2</sub>, CO e NO<sub>x</sub>. Os dados de concentração dos elementos na saída devem-se as poucas informações do experimento, de modo que os resultados podem ser melhorados entre simulação e experimento. Os campos de velocidade e de temperatura encontrados no ANSYS CFX estiveram de acordo com os dados experimentais.

Ziemniczac e da Silva (2012) analisaram o uso da simulação numérica em uma combustão pulverizada do carvão mineral tanto de modo convencional quanto a oxi-combustão, para posterior comparação entre os dois tipos de queima na caldeira. O programa computacional que utilizaram na análise da combustão foi o ANSYS CFX. A caldeira, que foi utilizada para obtenção das condições de contorno, é de uma usina termoelétrica, localizada no Rio Grande do Sul, que opera com carga de 15 MW<sub>e</sub>. Nos dois experimentos utilizou-se o carvão beneficiado tipo CE 3100.

No problema numérico foi empregado como domínio da simulação apenas a região que abrange a câmara de combustão, com as duas linhas de queimadores até a região de entrada do banco de tubos do economizador da caldeira, em que se considerou como saída do domínio com pressão de -400 Pa, como é mostrado na Figura 2.3.



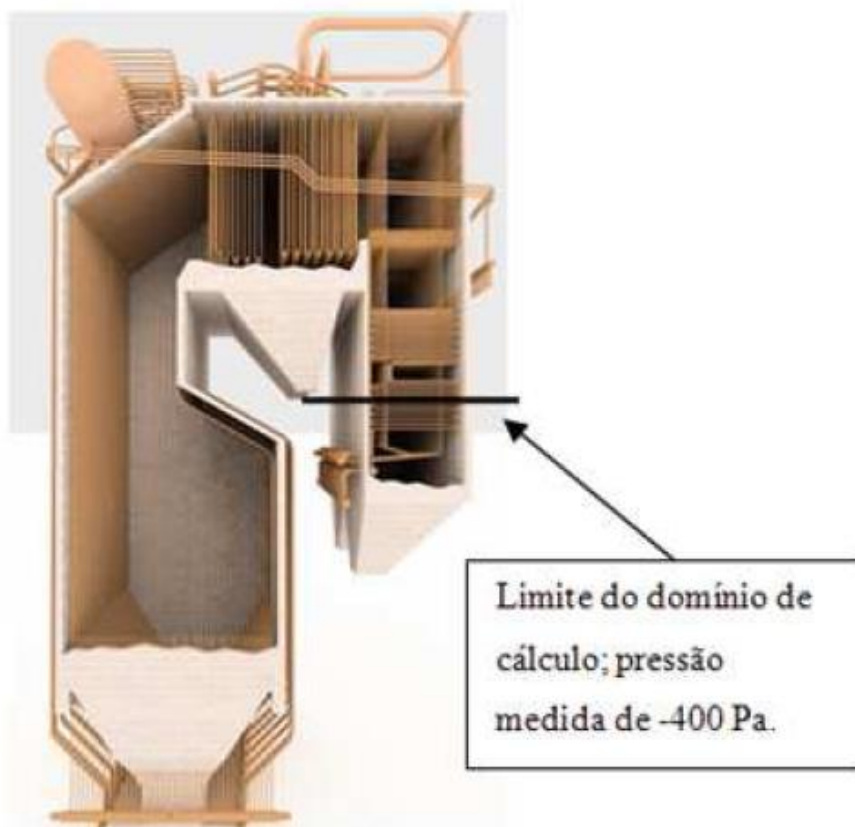


Figura 2.3 – Disposição geral da caldeira e término do domínio (ZIEMNICZAC e da SILVA, 2012).

O modelo de turbulência  $k-\omega$  foi usado na simulação. Utilizou-se para modelar a desvolatilização do carvão a taxa de Arrhenius de dois passos. A taxa de formação de espécie química ou taxa de destruição empregada foi o Eddy-Breakup-Arrhenius. Os demais modelos utilizados não estão disponibilizados neste artigo.

Os resultados analisados das simulações dos dois modos de combustão são: campo de temperatura, concentrações de espécies químicas de  $\text{NO}_x$ ,  $\text{CO}$  e  $\text{O}_2$ . As diferenças de campo de temperatura média, entre os dois tipos de combustão, não apresentaram muita diferença na região de saída da caldeira, 712,8 [K] e 715,3 [K], para a combustão convencional e oxi-combustão, respectivamente. Devido a um aumento na temperatura no queimador que realiza o processo de oxi-combustão, observa-se um aumento da fração mássica de  $\text{NO}_x$ , caso diferente do que ocorre com o processo convencional. A fração mássica de  $\text{CO}$  é reduzida no caso da oxi-combustão, devido a recirculação que ocorre dentro da caldeira. A alteração de fração volumétrica de oxigênio de 23% de  $\text{O}_2$  utilizado na combustão convencional para 30% de  $\text{O}_2$  para a oxi-combustão expõe melhor eficiência de queima e maior temperatura na caldeira.

Neste trabalho não foi realizado nenhuma mudança no queimador para oxi-combustão; apenas o ar foi substituído pelos gases  $O_2$  e  $CO_2$  e nenhum experimento para validação foi realizado. O trabalho apenas fez uma análise comparativa dos resultados numéricos da combustão convencional com a oxi-combustão substituindo o ar pelos gases  $O_2$  e  $CO_2$ .

Zen *et al.* (2011) estudaram a oxi-combustão em uma planta piloto com leito fluidizado borbulhante convencional de  $0,25 MW_{th}$ , localizado no laboratório de combustão da CIENTEC, UFRGS, com o escopo de avaliar a emissão de poluentes e dos diversos sistemas de combustíveis empregados, entre eles o carvão mineral e a biomassa. Os combustíveis analisados foram o carvão mineral Cambuí e Candiota, além da lenha picada, casca de arroz, serragem e resíduos florestais. As análises efetivadas foram de operações sem recirculação dos gases, estabelecimento de pressão positiva no sistema, operação utilizando a oxi-combustão e, as adaptações necessárias na planta piloto para a tecnologia de oxi-combustão.

Previamente, foi realizada uma combustão convencional com intenção de obter dados para adaptação da caldeira para a oxi-combustão. Observou-se que nos casos realizados, a terceira condição, necessitou-se de um ventilador para sucção dos gases que promoveu uma pressão negativa. Fez-se um ajuste com a finalidade de equilibrar a pressão em todos os pontos da planta através da válvula, conseguindo manter a pressão positiva no sistema. O processo de recirculação de gases e adição de  $O_2$  foi estabelecido posteriormente para promover a oxi-combustão. Este resultado demonstrou concentrações abaixo de  $CO_2$  requeridos pelo processo de oxi-combustão e também a infiltração de ar. No entanto, conseguiu-se uma concentração de  $NO_x$  menor emitida da oxi-combustão comparada à queima convencional. Pode-se concluir que para reduzir a infiltração de ar se torna necessária a ventilação de maior potência, que atende todo o circuito.

As revisões bibliográficas mostram que as pesquisas envolvidas com a oxi-combustão, na sua maioria estão em estágio laboratorial e piloto. Os estudos a respeito deste processo na maior parte foram realizados em outros países que possuem os melhores *ranks*, classificação do carvão mineral. No Brasil os estudos feitos na área da oxi-combustão do carvão mineral são poucos, devido ao carvão brasileiro ser na maioria sub-betuminoso ou betuminoso, além do carvão mineral ser encontrado descentralizada na região sul do país. De forma que os estudos estão mais concentrados nessa região, onde é utilizado esse combustível nas termoeletricas.

A maioria dos trabalhos de oxi-combustão em simulação numérica utilizam o programa computacional ANSYS FLUENT, sendo escassa as publicações com a simulação em ANSYS

CFX. Ainda não há estudos realizados comparando os resultados do ANSYS CFX e do ANSYS FLUENT que apontam as vantagens e as desvantagens da utilização de cada programa, no âmbito da oxidação aplicada a carvão mineral.

Verificou-se na literatura aberta que não há nenhum trabalho de oxidação do carvão mineral nacional, analisando sua viabilidade técnica e ambiental com o uso desta tecnologia para a geração termoelétrica brasileira.

O presente trabalho tem como foco a simulação numérica do comportamento termoquímico do carvão mineral brasileiro pulverizado, com o uso do software comercial ANSYS CFX, visando analisar o campo de temperatura e de velocidade, assim como os modelos de turbulência, combustão e radiação usados para o carvão mineral brasileiro. Realiza-se a validação da simulação numérica com os resultados de Kangwanpongpan (2013), Warzecha e Boguskawski (2014a) e Toporov *et al.* (2008) através do forno vertical de escala laboratorial de 100 kW<sub>th</sub>. Toporov *et al.* (2008) é responsável pelo experimento de oxidação e os dois autores citados acima utilizam-se dos resultados adquiridos no experimento para obtenção da validação dos respectivos modelos de oxidação.

Após validação da modelagem troca-se o carvão Rhenish pelo carvão nacional CE 5200, ambos realizando o processo de oxidação. Dessa forma se analisa o comportamento do carvão mineral brasileiro dentro do forno e, avalia-se a existência da possibilidade de adaptação das plantas térmicas à carvão mineral, de combustão convencional para oxidação.

## Capítulo 3

# MODELOS MATEMÁTICOS NA DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)

O capítulo 3 apresenta a modelagem matemática do CFD, no qual os fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos da oxi-combustão do carvão são modelados. Nesse trabalho os modelos selecionados para a queima do carvão mineral em CFD são da turbulência, desvolatilização, combustão do *char*, interação combustão-turbulência e radiação.

Os equacionamentos apresentados no trabalho foram baseados nas referências bibliográficas que auxiliaram à estruturação do capítulo. Dentre elas, pode-se citar os guias teóricos para modelagem do ANSYS CFX e a tese de Kangwanpongpan (2013), que desenvolveu um trabalho em CFD com os dados experimentais de um forno com a queima apenas de oxigênio como oxidante.

No capítulo, engloba-se os modelos de turbulência, seguindo a metodologia RANS, inicialmente com o modelo  $k-\epsilon$  padrão e posteriormente com o modelo SST. A reação em 1 passo foi utilizada para a modelagem da desvolatilização. A oxidação do carvão residual e combustão do *char* serão analisados pelos modelos Field e Gibb. O modelo de combustão aplicado é o EDFR e para radiação foi o DT (*Discrete Transfer*).

### 3.1. Equações Governantes do Problema

Na dinâmica dos fluidos, a teoria que fornece as leis de conservação da massa (continuidade), da quantidade de movimento e da energia são advindas do teorema de transporte de Reynolds.

O conceito do teorema de transporte de Reynolds é equivaler a análise sobre o efeito da massa individual (sistema) e a análise de um escoamento em região fixa (volume de controle, VC), ou seja, equivale a descrição Lagrangiana e a Euleriana, respectivamente. A equação (3.1) apresenta o teorema de transporte de Reynolds que descreve essa equivalência com a análise através das duas descrições citadas acima,

$$\frac{dB_{\text{sistema}}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \beta \rho dV + \int_{SC} \beta \rho \vec{V} \cdot \hat{n} dA \quad (3.1)$$

sendo que B é uma grandeza extensiva cuja medida é função da massa,  $\beta$  é uma grandeza intensiva que independe da massa,  $\rho$  é a massa específica,  $\vec{V}$  é o vetor velocidade e  $\hat{n}$  é o vetor unitário normal em cada ponto da superfície de controle do VC fixo.

#### 3.1.1. Equações da continuidade

A equação da continuidade na oxi-combustão do carvão mineral é dividida em duas parcelas. A primeira parcela relaciona a fase gasosa com a mistura de partículas e a segunda com a fase de partículas (sólida) somente.

##### 3.1.1.1. Mistura gasosa e partículas no estado gasoso

Aplicando o teorema de transporte de Reynolds em conjunto com o teorema de Gauss para a conservação de massa de gás (KANWANPONGPAN *et al.*, 2012), a equação da continuidade para a mistura gasosa com partículas é descrita pela equação (3.2).

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_{g,i})}{\partial x_i} = R_p \quad (3.2)$$

onde  $\rho_g$  é a massa específica da mistura gasosa,  $u_{g,i}$  a velocidade média do gás apontado para a direção  $i$  e  $R_p$  é a taxa de massa total do gás adicionado por unidade de volume da mistura devido à desvolatilização da partícula.

### 3.1.1.2. Partículas (estado sólido) somente

Igualmente a equação da continuidade para a fase gasosa, a fase do contínuo para as partículas pode ser descrita pela equação (3.3).

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_p u_{p,i})}{\partial x_i} = -R_p \quad (3.3)$$

sendo que  $\rho_p$  é a massa específica da partícula (fase sólida) e  $u_{p,i}$  é a velocidade média das partículas.

### 3.1.1.3. Mistura gás-partícula (geral)

Somando as duas equações (3.2) e (3.3), têm-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g + \rho_p) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g u_{g,i} + \rho_p u_{p,i}) = 0 \quad (3.4)$$

## 3.1.2. Equações da quantidade do movimento

Para o caso em estudo, multifásico, a equação da quantidade de movimento é dividida em três partes. A primeira é relacionada somente com a fase gasosa, a segunda à fase gasosa com mistura de partículas e a última com partículas somente (fase sólida).

### 3.1.2.1. Fase gasosa

Aplica-se o teorema de transporte de Reynolds para vários elementos do fluido. A equação da mistura de vários gases específicos é fornecida pela equação (3.5):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g u_{g,i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_g u_{g,i} u_{g,j}) = -\frac{\partial p_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho_g BD_i \quad (3.5)$$

sendo que os subscritos  $i$  e  $j$  são os componentes da velocidade em cada direção,  $p_i$  é a pressão estática,  $\tau_{ij}$  é o tensor das tensões viscosas e  $BD_i$  é a soma das força de contato agindo no fluido  $i$ .

### 3.1.2.2. Mistura gasosa e partículas (estado gasoso)

Emprega-se o teorema de transporte de Reynolds junto com o teorema da divergência na quantidade de movimento da fase gasosa para os fluidos que participam da oxi-combustão, além de assumir que as partículas são esféricas, e tem um momento de fluxo uniforme na superfície da partícula (KANGWANPONGPAN, 2013). Dessa forma a equação é descrita pela equação (3.6).

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\dot{\rho}_g u_{g,i})}{\partial t} + \frac{\partial(\dot{\rho}_g u_{g,i} u_{g,j})}{\partial x_j} \\ = -\frac{\partial p_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(1 - FV)\tau_{def,ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial(FV)\tau_{ij}}{\partial x_j} - f_{p,i} + \dot{\rho}_g BD_i + u_{p,i} R_p \end{aligned} \quad (3.6)$$

sendo  $\tau_{def,ij}$  é o tensor das tensões viscosas agindo na partícula devido a taxa de deformação do fluido,  $f_{p,i}$  é a força aerodinâmica agindo na partícula por unidade de volume da mistura,  $FV$  é a fração volumétrica da fase gasosa que é ocupado pela mistura gás-partícula.

A relação da fração volumétrica  $FV$  é fornecida pela equação (3.7).

$$\dot{\rho}_g = FV \rho_g \quad (3.7)$$

A observação que pode ser feita é que para a maioria dos casos em que há combustão do carvão pulverizado, a utilização de partículas tem um volume bem pequeno comparado com o fluido gasoso. Com isso, a fração volumétrica usualmente utilizada nesse processo é bem próxima de 1 e assim, pode ser desprezada a parcela que contém  $(1 - FV)\tau_{def,ij}$  (KANGWANPONGPAN, 2013). O último termo da equação (3.6) se refere a adição de massa. O valor é obtido pelo somatório das velocidades das partículas,  $u_{p,i}^{ps}$ , associado a um determinado tamanho  $k$  da partícula, como se observa na equação (3.8).

$$u_{p,i}R_p = \sum_k u_{p,i}^{ps} R_p^{ps} \quad (3.8)$$

sendo que o termo,  $R_p^{ps}$ , representa a taxa de queima de um determinado tamanho de partícula por volume de mistura.

### 3.1.2.3. Partícula (estado sólido)

Na fase de partícula (fase sólida) a equação da quantidade de movimento é escrita pela equação (3.9).

$$\frac{\partial(\rho_p u_{p,i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_p u_{p,i} u_{p,j})}{\partial x_j} + \sum_k [\rho_p (u_{p,j}^{ps})_{rel} (u_{p,j}^{ps})_{rel}] = f_{p,i} + \rho_p B D_i - u_{p,i} R_p \quad (3.9)$$

sendo  $\rho_p u_{p,i}$  escrito conforme a equação (3.10).

$$\rho_p u_{p,i} = \sum_k \rho_{p,i}^{ps} u_{p,i}^{ps} \quad (3.10)$$

onde

$$(u_{p,i}^{ps})_{rel} = u_{p,j}^{ps} - u_{p,i} \quad (3.11)$$



### 3.1.2.4. Mistura gás-partícula (geral)

A combinação das três equações da quantidade de movimento apresentadas para a fase gasosa, mistura gasosa e partícula, fornece a equação geral da mistura gás-partícula, equações (3.5), (3.6) e (3.9). Dessa forma, desenvolve-se a equação total da mistura gás-partícula conforme mostrado pela equação (3.12) (KANGWANPONGPAN, 2013).

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(\rho_g u_{g,i} + \rho_p u_{p,i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_{g,i} u_{g,j} + \rho_p u_{p,i} u_{p,j})}{\partial x_j} \\
 & = -\frac{\partial p_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(1 - FV)\tau_{def,ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial(FV)\tau_{ij}}{\partial x_j} + (\rho_g + \rho_p)BD_i \\
 & \quad - \sum_k \left[ \rho_p (u_{p,j}^{ps})_{rel} (u_{p,j}^{ps})_{rel} \right]
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

### 3.1.3. Equações da energia

A equação da energia é dividida em duas partes para posterior soma, a fim de atender o processo de oxí-combustão do carvão mineral pulverizado. A primeira parcela é relacionada a mistura de gás-partícula e, a outra parcela com a fase de partículas (fase sólida) somente (KANGWANPONGPAN, 2013).

#### 3.1.3.1. Mistura gasosa e partículas (estado gasoso)

Emprega-se o teorema de transporte de Reynolds na primeira lei da termodinâmica, separando o volume de controle para a fase gasosa e, para as partículas. Dessa forma a equação (3.13) é descrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_g \left( e_g + \frac{|u_{g,i}|^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \rho_g \left( h_g + \frac{|u_{g,i}|^2}{2} \right) u_{g,i} \right] \\
&= - \frac{\partial}{\partial x_j} [FVq_j + (1 - FV)q_{s,j}] - q_{cp} + FVq_{rg} \\
&+ R_p \left( \bar{h}_s + \frac{|u_{p,i}|^2}{2} + \frac{\dot{w}^2}{2} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} [(1 - FV)pu_{p,i}] \\
&+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ FV\tau_{ij} \frac{\partial u_{g,i}}{\partial x_j} + (1 - FV)\tau_{def,ij} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \right] - u_{p,i}f_{p,i} + \rho_g BD_i u_{g,i} \\
&+ \bar{p}_s s_v
\end{aligned} \tag{3.13}$$

sendo que  $e_g$  é a energia interna específica,  $u_{g,i}$  é a velocidade da mistura do gás  $k$  na direção do vetor  $i$ ,  $h_g$  é a entalpia específica do gás. As formas de transmissão de calor estão representados por:  $q_j$ , calor específico total por condução na direção  $j$ ;  $q_{s,j}$ , calor específico do gás através da partícula na direção  $j$ ;  $q_{cp}$ , calor por condução do gás para a partícula na unidade de volume de mistura;  $q_{rg}$ , calor absorvido por radiação pela fase gasosa. Os parâmetros do gás sobre a superfície de controle da partícula são apresentadas por:  $\bar{h}$  que representa a entalpia específica média e  $\dot{w}$  a velocidade. Por último, encontra-se na superfície da partícula a pressão média,  $\bar{p}_s$ , e a taxa de dilatação da superfície por unidade de volume da mistura,  $s_v$ .

### 3.1.3.2. Partícula (estado sólido)

Na partícula a equação da energia é obtida pelo teorema de transporte de Reynolds com a energia em uma única partícula, conforme a equação (3.14).

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_p \left( e_p + \frac{|u_{p,i}|^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \rho_p u_{p,i} \left( e_p + \frac{|u_{p,i}|^2}{2} \right) u_{g,i} \right] \\
&= -R_p \left( \bar{h}_s + \frac{|u_{p,i}|^2}{2} + \frac{\dot{w}^2}{2} \right) + u_{p,i}f_{p,i} + \rho_p BD_{g,i} u_{p,i} + q_{cp} + q_{rp} \\
&+ \bar{p}_s s_v
\end{aligned} \tag{3.14}$$

sendo que  $e_p$  é a energia interna da partícula,  $q_{cp}$  é a transferência de calor absorvida pela partícula e  $q_{rp}$  é a transferência de calor absorvido por radiação pela partícula.

### 3.1.3.3. Mistura gás-partícula (geral)

A combinação das duas equações da energia apresentadas para a fase gasosa e para a partícula, equações (3.13) e (3.14), fornecem a equação geral da mistura gás-partícula. Dessa forma, se desenvolve a equação total da mistura gás-partícula, equação (3.15) (KANGWANPONGPAN, 2013).

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left[ \dot{\rho}_g \left( e_g + \frac{|u_{g,i}|^2}{2} \right) + \dot{\rho}_p \left( e_p + \frac{|u_{p,i}|^2}{2} \right) \right] \\
 & + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \dot{\rho}_g \left( h_g + \frac{|u_{g,i}|^2}{2} \right) u_{g,i} + \dot{\rho}_p u_{p,i} \left( e_p + \frac{|u_{p,i}|^2}{2} \right) u_{g,i} \right] \\
 & = - \frac{\partial}{\partial x_j} [FV q_j + (1 - FV) q_{s,j}] + FV q_{rg} \\
 & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ FV \tau_{ij} \frac{\partial u_{g,i}}{\partial x_j} + (1 - FV) \tau_{def,i} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \right] \\
 & + BD_{g,i} (\dot{\rho}_p u_{p,i} + \dot{\rho}_p u_{p,i})
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

## 3.2. Turbulência

O escoamento turbulento na combustão pulverizada do carvão é influenciado pela taxa de mistura de espécie (KANGWANPONGPAN, 2013). A turbulência causa impactos em todos os aspectos da combustão, desde a transferência de calor até a cinética química. A forma a ser analisada, no forno pulverizado, deve ser considerada tridimensional devido às geometrias complexas e, a natureza não homogêneas das interações do escoamento turbulento com os processos físicos e químicos que ocorrem (EDGE *et al.*, 2011b).

Devido à complexidade da turbulência, citada acima para a oxi-combustão pulverizada do carvão mineral, faz-se o auxílio da ferramenta computacional para solucionar as equações

de conservação apresentadas no item 3.1. Dessa forma, as maneiras de se determinar o escoamento turbulento são através de três modelos de turbulência:

**Equações Média de Reynolds (RANS – *Reynolds Average Navier-Stokes Equations*):** interessante em resolver o escoamento e os efeitos da turbulência através das propriedades médias do escoamento. A solução apenas do escoamento médio faz com que trabalhe-se com a grande parte do equacionamento através de modelagem matemática para fechar as equações de RANS. Dessa forma, com a modelagem o custo computacional é baixo, comparado as demais simulações que serão apresentadas. A desvantagem que surge desse modelo de turbulência é a exatidão dos resultados que é limitado por abranger suposições empregadas na modelagem.

**Simulação de Grande Escala (LES - *Large Eddy Simulation*):** é caracterizada por considerar um filtro que separa os grandes vórtices (*swirl*) que transportam energia (as grandes escalas) e os pequenos vórtices (*swirl*) (as pequenas escalas) (de SOUZA *et al.*, 2011). Nesta técnica, as grandes escalas são calculadas diretamente a partir das equações de Navier-Stokes e para as pequenas escalas são utilizados modelos de sub-escalas. O tempo computacional do modelo de turbulência LES é maior do que o modelo RANS, isso requer uma maior capacidade computacional comparada ao modelo RANS. LES tem mostrado melhor eficiência com relação a previsão da taxa química de mistura e velocidade de dissipação do que RANS (EDGE *et al.*, 2011b). Devido ao alto tempo computacional da metodologia LES, justifica-se um extenso estudo preliminar em RANS.

**Simulação Numérica Direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*):** não é necessário modelo de turbulência para solucionar as equações de Navier-Stokes tridimensionais e transiente, ou seja, para a solução das equações de Navier-Stokes, as malhas devem ser bem finas e com passo de tempo pequeno para capturar toda as escalas de turbulência. Assim, adquire-se alta precisão dos resultados. Porém, isso exige um custo computacional alto e, é atualmente difícil ser aplicado nos problemas de combustão. Assim, no momento a DNS fica restrita à geometria simples e de baixo número de Reynolds.

Com a descrição acima das ferramentas computacionais RANS, LES e DNS consegue-se dizer que RANS é o que possui maior grau da modelagem, mais modelos que simplificam os cálculos, assim exige baixo custo computacional. Enquanto que DNS encontra-se no outro extremo, com poucas simplificações das leis de conservações, entretanto necessita de maior custo computacional para soluções dos problemas, porém existe uma maior exatidão dos

resultados. LES encontra-se entre RANS e DNS, isto é, possui grau de modelagem menor que RANS e custo computacional mais baixo que DNS, como é mostrado na Figura 3.1.

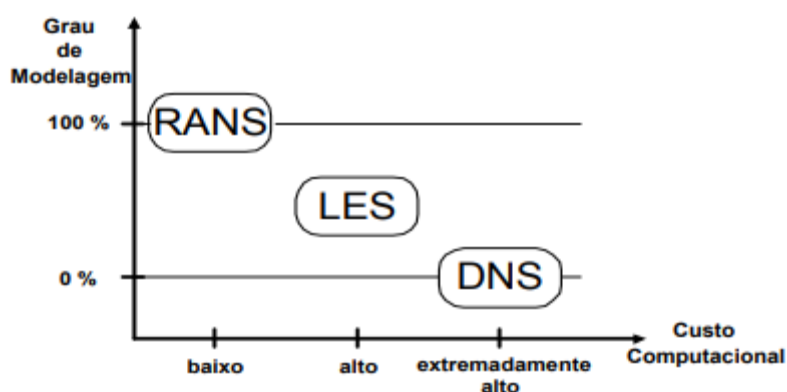


Figura 3.1 – Grau de modelagem versus custo computacional dos modelos de turbulência (REZENDE, 2009).

Dentre os modelos de turbulência apresentados anteriormente, utilizou-se no trabalho o modelo RANS, desta forma não será feito um estudo das demais metodologias de solução de turbulência. Empregou-se o modelo RANS para a simulação, por se tratar de um projeto preliminar da oxi-combustão de carvão mineral pulverizado em forno de queda livre e por também por fornecer dados qualitativos de quão bom é a oxi-combustão para o carvão mineral brasileiro. Dessa forma, necessitando de uma capacidade computacional menor, mas propondo resultados confiáveis que representam o fenômeno em estudo. Assim, os demais itens deste capítulo discutem os modelos que podem ser usados no ANSYS CFX e quais serão empregados no presente trabalho.

### 3.2.1. Equações médias de Reynolds (RANS)

As equações de médias de Reynolds (RANS) são advindas de três princípios (equações de conservação). Esses princípios de conservação são necessários para a influência do campo de escoamento médio e caracterizar a flutuação turbulenta. Dessa forma, reduz-se através da utilização da modelagem computacional, o custo computacional através do uso de malhas mais leves e maiores incrementos de tempo (ANSYS INC, 2013).

Portanto a modelagem de turbulência RANS é considerada uma decomposição de Reynolds em que é composta por uma média temporal e outra parte flutuante do escoamento (ANSYS INC, 2013). A equação (3.16) mostra a decomposição de Reynolds para a velocidade.

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (3.16)$$

sendo que  $u_i$  representa a velocidade instantânea,  $\bar{u}_i$  é a velocidade média e  $u_i'$  é o parâmetro da flutuação da velocidade.

Após inseridos os componentes médios e a flutuação de velocidade e massa específica, apresenta-se a média temporal RANS nas três equações conservativas (KANGWANPONGPAN *et al.*, 2012).

### 3.2.1.1. Equação da continuidade

A equação da continuidade da mistura gasosa é representada pela equação (3.17).

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}_g \bar{u}_j + \overline{\rho'_g u'_j})}{\partial x_j} = 0 \quad (3.17)$$

onde  $\bar{\rho}_g$  é a massa específica média da mistura gasosa,  $\bar{u}_j$  a velocidade média da mistura gasosa na direção j,  $\overline{\rho'_g}$  é o parâmetro de flutuação da massa específica média da mistura gasosa e  $\overline{u'_j}$  é o parâmetro de flutuação da velocidade da mistura gasosa na direção j.

### 3.2.1.2. Equação da quantidade de movimento

A equação da quantidade de movimento da mistura gasosa é mostrada na equação (3.18).

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_g \bar{u}_i + \overline{\rho'_g u'_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_g \bar{u}_i \bar{u}_j + \overline{u'_i \rho'_g u'_j}) \\ & = - \frac{\partial \bar{p}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{u'_j \rho'_g u'_i} - \overline{\rho'_g u'_i u'_j} - \overline{\rho'_g u'_i u'_j}) \end{aligned} \quad (3.18)$$

sendo o termo  $-\overline{u_i u_j}$  chamado de tensor de Reynolds causado por um espectro de flutuações de velocidades que requer equações adicionais de fechamento, assim necessita-se de modelos para avaliar o tensor.

### 3.2.1.3. Equação da energia - escoamento incompressível (temperatura estática)

A equação da energia para escoamento incompressível da mistura gasosa é mostrada na equação (3.19).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g C_P \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_g C_P \bar{u}_j \bar{T}) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ K_{cond} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} - \rho_g C_P \bar{T} \bar{u}_j \right] + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \left[ u_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}} \right] + \bar{\Phi} + \frac{\partial Q}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde a função de dissipação média é dada pela equação (3.20).

$$\bar{\Phi} = \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \quad (3.20)$$

e a equação constitutiva da tensão viscosa é fornecida pela equação (3.21).

$$\tau_{ij} = \nu \left[ \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right] \quad (3.21)$$

Em que  $\nu$  representa a viscosidade cinemática e  $\delta_{ij}$  o delta de Kronecker (REZENDE, 2009).

Dentro do forno, a mistura gasosa pode ser considerada como um escoamento incompressível, devido a pressão de saída ser atmosférica (1 atm) aproximadamente igual a pressão da combustão, que ocorre no próprio forno. Dessa forma, a flutuação das massas específicas  $\dot{\rho} = 0$  são eliminadas das equações (3.17) e (3.18) (KANGWANPONGPAN *et al.*, 2012).

### 3.2.2. Modelos de turbulência

A modelagem de turbulência RANS para os problemas de fechamento devido ao tensor de Reynolds, nesta tese, são descritas na forma de duas equações ou sete equações. Os modelos de duas equações solucionam a velocidade e a escala de comprimento, de forma individual, através de equações de transporte. Enquanto, o modelo de sete equações além de utilizar as duas equações de forma mais rigorosa, contabilizam o *swirl*, a recirculação, a curvatura das linhas de corrente, a taxa de deformação e a taxa de dissipação. Estes modelos RANS constam no programa comercial ANSYS CFX.

#### 3.2.2.1. Modelos de transporte de duas equações

O modelo de duas equações oferece um melhor desempenho comparados aos modelos de zero ou uma equação, que não são discutidos neste trabalho. Dentre esses avanços estão a aplicação numérica e o tempo computacional, devido a fatores de fechamento da turbulência. Como consequência, o modelo de duas equações é amplamente empregado em aplicações práticas de engenharia.

As escalas de velocidade e de comprimento separadamente solucionam a equação de transporte, por isso a razão do nome do modelo de transporte. O primeiro é determinado por energia cinética turbulenta  $k$ , o seguinte por duas propriedades do campo de velocidade, usualmente energia cinética turbulenta e taxa de dissipação (ANSYS INC, 2013).

Os modelos apresentados no presente trabalho são os que possuem no programa ANSYS CFX, sendo alguns deles selecionados na análise e, apresentados nos resultados e discussões.

**Modelo k- $\epsilon$**  é o modelo de turbulência mais utilizado na indústria devido a sua simplicidade e baixo custo computacional. Na indústria, esse modelo tem um excelente desempenho e consegue solucionar os respectivos problemas a ele aplicado. Além disso, o modelo k- $\epsilon$  é o que tem a maior quantidade de validação experimental (SICORSKI, 2006).

A formulação da equação de transporte é baseada na energia cinética turbulenta,  $k$ , e na taxa de dissipação,  $\epsilon$ . A equação de transporte diferencial para a energia cinética é exatamente igual a equação de RANS, equação (3.22).



$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \bar{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho_g \varepsilon - Y_M + S_k \quad (3.22)$$

sendo que  $G_k$  e  $G_b$  são energia cinética turbulenta gerada devido ao gradiente de velocidade média e de gravidade, respectivamente,  $S_k$  representa o termo fonte de entrada para a equação de energia cinética,  $Y_M$  é a contribuição da compressibilidade turbulenta para a taxa de dissipação,  $\sigma_k$  é o número de Prandtl turbulento.

Enquanto que para taxa de dissipação a equação de transporte é obtida de forma empírica, apresentado na equação (3.23).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \varepsilon) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - \rho_g C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (3.23)$$

sendo que  $S_\varepsilon$  representa o termo fonte de entrada para a equação da taxa de dissipação e  $\sigma_\varepsilon$  é um número de Prandtl turbulento.

Os parâmetros  $C_\mu$ ,  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são variáveis abrangentes para uma grande extensão de escoamento turbulento da literatura (KANGWANPONGPAN, 2013). O parâmetro  $C_{3\varepsilon}$  determina o efeito do empuxo (flutuação) e seu grau de efeito no escoamento.

A energia cinética gerada,  $G_k$ , pode ser formulada com a hipótese de *Boussinesq* para o gradiente da difusão dos escoamentos incompressíveis (Kangwanpongpan, 2013):

$$G_k = -\rho \overline{\dot{u}_i \dot{u}_j} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} = \left[ \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \mu_t S^2 \quad (3.24)$$

onde  $S$  é definido como o módulo do tensor de deformação, equação (3.25).

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (3.25)$$

sendo  $S_{ij}$  o tensor de taxa de deformação, definido pela equação (3.26).

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.26)$$

Com o modelo k- $\epsilon$ , tem-se que o termo da viscosidade turbulenta pode ser escrito pela relação de *Prandtl-Kolmogorov* dada pela equação (3.27).

$$\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho} = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.27)$$

**Modelo RNG k- $\epsilon$**  foi desenvolvido por Yakhot *et al.* (1992) através de técnica de Grupo de Renormalização (RNG) que deriva as equações de Navier-Stokes. Este modelo, RNG k- $\epsilon$ , melhora vários inconvenientes que o modelo k- $\epsilon$  possui. Dentre essas melhorias estão o efeito de elevado turbilhonamento, regiões de separação e escoamento de baixo número de Reynolds (KANGWANPONGPAN *et al.*, 2012; RAPOSO, 2008).

As equações de transporte, (3.28) e (3.29), têm a seguinte forma para o modelo RNG k- $\epsilon$ .

Para a energia cinética turbulenta  $k$ , inserido no transporte, tem-se a seguinte forma para o modelo RNG k- $\epsilon$ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_g \bar{u}_i \bar{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho_g \epsilon - Y_M + S_k \quad (3.28)$$

A taxa de dissipação da energia cinética  $\epsilon$  no modelo RNG k- $\epsilon$  é apresentada pela equação (3.29).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_g \bar{u}_i \epsilon) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \alpha_\epsilon \mu_{eff} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - \rho_g C_{2\epsilon}^* \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \end{aligned} \quad (3.29)$$

Nas equações da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação,  $\alpha_\epsilon$  e  $\alpha_k$  corresponde aos inversos dos números de Prandtl, respectivamente, e são determinados através da teoria RNG.

**Modelo k- $\omega$  *baseline* (BSL)**, o modelo k- $\omega$  desenvolvido por Wilcox (1998) descreve a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , como segue na equação (3.30), através de duas equações de transporte turbulento, onde  $k$  representa a energia cinética turbulenta e  $\omega$  representa a taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta.

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (3.30)$$

Portanto, no transporte de Reynolds, o modelo apresentado pela formulação de Wilcox para a energia cinética turbulenta  $k$ , é mostrado com a equação (3.31).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \bar{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k1}} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] + G_k - \beta' \rho_g k \omega \quad (3.31)$$

E o transporte de Reynolds, para a taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta, é representada pela equação (3.32).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + C_{1\omega} \frac{\omega}{k} G_k - \beta_1 \rho_g k \omega^2 \quad (3.32)$$

A vantagem da formulação do modelo k- $\omega$  é que com o tratamento próximo às paredes, para baixos número de Reynolds existe um bom desempenho, por consequência se obtêm uma maior precisão e robustez. A desvantagem é a exigência de uma malha mais refinada próximo as paredes comparada aos modelos baseados em k- $\epsilon$ , pois caso contrário pode-se antecipar a separação do escoamento (DEON, 2016).

O modelo BSL obtém como principal problema a determinação do valor de  $\omega$ , na entrada, da corrente livre, pois pode possuir uma significativa variação no resultado. Essa condição de variação no resultado é indesejável. Portanto, Menter (1993) desenvolveu uma fórmula que está entre os dois modelos, em que utiliza na região do escoamento k- $\epsilon$  e o k- $\omega$  na região da superfície. Dessa forma, aprimorou-se o modelo k- $\omega$  multiplicando por  $F_1$  e as equações k- $\epsilon$  modificadas, multiplicadas por uma função  $1-F_1$ . As correspondentes equações  $k$  e  $\omega$  são adicionadas para fornecer o modelo BSL (ANSYS INC, 2013).

A equação (3.33) da energia cinética turbulenta  $k$  para o modelo k- $\omega$  BSL é da seguinte forma.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \bar{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] + G_k - \beta' \rho_g k \omega + G_{kb} \quad (3.33)$$

A equação (3.34) da taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta  $\omega$  fica da seguinte forma para o modelo k- $\omega$  BSL.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_g \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \omega) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + (1 - F_1) 2 \rho_g \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \\ &+ C_{3\omega} \frac{\omega}{k} G_k - \beta_3 \rho_g \omega^2 + G_{\omega b} \end{aligned} \quad (3.34)$$

**Modelo k- $\omega$  Shear Stress Transport (SST)**, Menter em 1994 desenvolveu uma variação do modelo k- $\omega$  para o transporte da tensão cisalhante turbulenta através da modificação da viscosidade turbulenta. Esse modelo é empregado através de uma função de harmonização entre k- $\epsilon$  e k- $\omega$ . O modelo k- $\epsilon$  é usado longe das paredes e o k- $\omega$  empregado na região próxima a elas. O modelo SST possui termos alternados para que assim se possa trabalhar tanto em escoamento de baixo número de Reynolds, quanto em alto número de Reynolds. Dessa forma, se fornece uma alta precisão do início da camada limite e da quantidade do escoamento que se separa pelo gradiente adverso de pressão, comparado com os modelos k- $\omega$ .

O modelo k- $\omega$  SST nas regiões com deformação normal ou elevada, como os de regiões de estagnação e de grande aceleração, produz altos níveis de turbulência. É exigido uma malha refinada próxima as paredes, assim como os modelos k- $\omega$  BSL. Devido a utilização da função de harmonização para o modelo SST é indicado que o mesmo seja usado em escoamentos livres como função da distância das paredes (DEON, 2016).

A equação de transporte usando o modelo k- $\omega$  SST para a energia cinética turbulenta  $k$  é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \bar{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] + \tilde{G}_k - Y_k + S_k \quad (3.35)$$

e utilizando o modelo k- $\omega$  SST para a taxa de dissipação específica da energia cinética turbulenta  $\omega$  aplicada a equação de transporte, equação (3.36) fica da seguinte maneira:

$$\frac{\partial(\rho_g \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{u}_i \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\omega \quad (3.36)$$

sendo que  $\tilde{G}_k$  é a geração de energia cinética turbulenta devida ao gradiente de velocidade média, determinada pelo termo  $G_k$  do modelo k- $\epsilon$ ,  $G_\omega$  é a geração de  $\omega$ .  $Y_k$  e  $Y_\omega$  representa a dissipação da energia cinética,  $k$ , e da taxa de dissipação específica,  $\omega$ .  $S_k$  e  $S_\omega$  são termos fontes (KANGWANPONGPAN *et al.*, 2012).

**Modelos de Transporte do Tensor de Reynolds (RSM)** dentre os modelos RANS, é o mais complicado, porém, tem uma grande precisão dos resultados. Esse modelo tem forte influência na melhoria do *swirling*, no escoamento rotacional e na mudança rápida da taxa de tensão. No caso do presente trabalho, o modelo de turbulência RSM atende muito bem, pois a simulação é de escoamento multifásico, que necessita de modelos mais aprimorados. Contudo, esse método consome um tempo computacional maior dentre os demais modelos RANS.

O modelo RSM é baseado em equação de transporte para componentes individuais do tensor de Reynolds e taxa de dissipação, e a solução das suas equações também.

A equação de transporte para o modelo RSM é dado por (KANGWANPONGPAN, 2013):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \bar{u}_i \bar{u}_j) + \text{convectivo}(C_{ij}) = \\ = \text{difusão turbulenta}(D_{T,ij}) + \text{difusão molecular}(D_{L,ij}) \\ + \text{produção de tensão}(P_{ij}) + \text{produção de gravidade} \\ + \text{pressão – tensão}(\Phi_{ij}) + \text{dissipação viscosa}(\epsilon_{ij}) \\ + \text{produção devido à rotação}(F_{ij}) \\ + \text{termo fonte definido pelo usuário} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Os termos da equação (3.37) que não necessitam modelagem são convectivo, difusão molecular, produção de tensão e produção devido à rotação (RAPOSO, 2008).

O transporte convectivo que representa o tensor de Reynolds ao longo do escoamento turbulento,  $C_{ij}$ , é determinado da seguinte forma:

$$C_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho_g u_k \overline{u_i u_j}) \quad (3.38)$$

A taxa de difusão do tensor de Reynolds devido a viscosidade molecular  $\mu$  do fluido,  $D_{L,ij}$ , é obtido por:

$$D_{L,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u_i u_j}) \right] \quad (3.39)$$

A taxa de criação ou destruição, produção de tensão, da tensão turbulenta ao longo do escoamento,  $P_{ij}$ , é calculada por:

$$P_{ij} = -\rho \left( \overline{u_i u_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u_j u_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (3.40)$$

O termo de produção devido à rotação,  $F_{ij}$ , é obtido da seguinte forma:

$$F_{ij} = -2\rho_g \Omega_k (\overline{u_j u_m} e_{ikm} + \overline{u_i u_m} e_{jkm}) \quad (3.41)$$

onde  $e_{ikm}$  é o símbolo de permutação e  $\Omega_k$  é a rotação.

Lien e Leschziener (1994) modelaram a taxa de difusão turbulenta do tensor de Reynolds,  $D_{T,ij}$ , no qual utilizou-se a constante  $\sigma_k = 1,0$ , como segue:

$$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u_i u_j}) \right] \quad (3.42)$$

A taxa de dissipação do tensor de Reynolds devido à viscosidade  $\mu$ ,  $\varepsilon_{ij}$ , é adquirido através da equação (3.43):

$$\varepsilon_{ij} = -\rho\mu \frac{\overline{\partial u_i \partial u_j}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (3.43)$$

A pressão-tensão  $\Phi_{ij}$  utilizada no trabalho foi o modelo SSG desenvolvido por Speziale, Sarkar e Gatski em 1991, que fornece uma relação quadrática para correlacionar pressão-tensão.

$$\begin{aligned} \Phi_{ij} = & -(C_1\varepsilon + C_1^*P)b_{ij} + C_2\varepsilon \left( b_{ik}b_{kj} - \frac{1}{3}\mathfrak{I}\delta_{ij} \right) + \left( C_3 - C_3^*\sqrt{b_{ik}b_{kj}} \right) \rho k S_{ij} \\ & + C_4\rho k \left( b_{ik}S_{jk} + b_{jk}S_{ik} - \frac{2}{3}b_{kl}S_{kl}\delta_{ij} \right) + C_5\rho k (b_{ik}\Omega_{jk} + b_{jk}\Omega_{ik}) \end{aligned} \quad (3.44)$$

onde  $b_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{2k} - (1/3)\delta_{ij}$  representa o tensor anisotrópico e  $\mathfrak{I} \equiv b_{kl}b_{kl}$  o segundo invariante do tensor anisotrópico.  $\Omega_{jk}$  é a tensão de rotação,  $S_{ik}$  é o tensor de tensões médias e  $C_1$  a  $C_5$  são os coeficientes da equação (3.44)

### 3.2.3. Comparação entre os modelos de turbulência

A Tabela 3.1 mostra uma comparação dos modelos de turbulência com intuito de avaliar quais modelos poderiam ser utilizados nesse trabalho.

Os modelos utilizados no presente trabalho foram k- $\varepsilon$  padrão e SST, pois utilizou-se um modelo de turbulência simples (k- $\varepsilon$  padrão) que fornece resultados menos precisão e um modelo que é mais robusto (SST) que fornece resultados mais precisos comparado ao primeiro modelo. A proposta de utilizar estes dois modelos no trabalho tem como objetivo, comparar k- $\varepsilon$  padrão e SST, de modo a avaliar um modelo simples comparado a outro mais robusto, porém obtendo resultados do escoamento mais próximo do real.

Tabela 3.1 – Vantagens e desvantagens dos modelos de turbulência analisados nessa tese (KANGWANPONGPAN, 2013).

| Modelo de turbulência | Vantagem | Desvantagem |
|-----------------------|----------|-------------|
|                       |          |             |

|                 |  |   |
|-----------------|--|---|
| k- $\epsilon$   | Modelo mais utilizado pela indústria, pela simplicidade e baixo tempo computacional.   | Baixa precisão para escoamento com <i>swirl</i> e escoamento próximo a parede.                      |
| RNG             | Melhora vários inconvenientes que o modelo k- $\epsilon$ possui.   | Utiliza maior tempo computacional, entre 10 a 15% em relação ao modelo k- $\epsilon$ .              |
| BSL k- $\omega$ | Tem-se para baixo número de Reynolds um bom desempenho, por consequência se obtêm uma maior precisão e robustez.   | Requer uma malha mais refinada próximo as paredes comparada aos modelos baseados em k- $\epsilon$ . |
| SST k- $\omega$ | Fornecer robustez e precisão de k- $\epsilon$ padrão aplicado nos escoamentos distante da parede e k- $\omega$ para escoamentos próximos as paredes e ao cisalhamento livre. | Pouca precisão comparado ao modelo RSM quando exibe anisotropia de tensão normal.                   |
| RSM             | Tem forte influência na melhoria do <i>swirl</i> , na recirculação e na mudança rápida da taxa de tensão (escoamento complexo).  | Um maior tempo de simulação computacional dentre todos os modelos RANS.                             |

### 3.3. Desvolatilização

A primeira etapa de queima do carvão ocorre de duas maneiras, pirólise ou desvolatilização. A pirólise ocorre em carvão que se encontra em temperaturas entre 673 a 1073 [K] e a decomposição termoquímica age sem a presença de oxigênio (ZHENG e LIU, 2017). A desvolatilização é o mesmo processo, porém com a participação do oxigênio. A desvolatilização é o que ocorre na queima de fornos, pois na entrada possui oxidante que é oxigênio.

A desvolatilização do carvão depende em especial de muitos fatores, tais como, a temperatura máxima, calor, pressão e tamanho de partícula. As partículas de carvão injetadas no forno através da corrente de oxidante são aquecidas por meio da transferência de calor por



convecção e radiação. A radiação térmica é o mecanismo predominante de transferência de calor, após a injeção da partícula em um forno.

Quando a temperatura das partículas atinge 650 [K], surge a decomposição térmica de moléculas. Inicia-se o processo de desvolatilização e nesse processo os produtos gasosos são liberados e, os voláteis são transportados por difusão via estrutura porosa. O produto gasoso da desvolatilização chamado material volátil (VM) são compostos de alcatrão ou de hidrocarboneto pesado, hidrocarbonetos leves e gases leves, tais como CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O (KANGWANPONGPAN, 2013).

O resíduo sólido da decomposição térmica chamado de *char*, consiste principalmente de carbono e cinzas. O diagrama esquemático da desvolatilização do carvão é ilustrado na Figura 3.2.

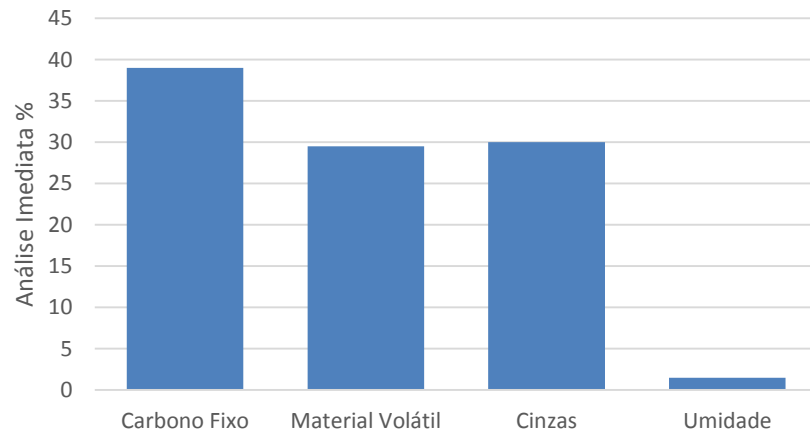


Figura 3.2 - Composição do carvão mineral CE 5200.

### 3.3.1 Modelo de desvolatilização

Na simulação numérica da desvolatilização do carvão mineral foi utilizado o modelo cinético de Badzioch e Hawksley que é de 1 passo (ANSYS INC, 2013).

$$-\frac{dm_p}{dt} = k_v [m_p - (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0}] \quad (3.45)$$

onde  $m_p$  e  $m_{p,0}$  são a massa do carvão inicial e do carvão bruto,  $f_{v,0}$  a fração mássica de matéria volátil na base seca e  $f_{w,0}$  a fração mássica de umidade inicial.

A constante  $k_v$  é obtida da equação de Arrhenius como:

$$k_v = A_v \exp\left(-\frac{E_v}{RT_p}\right) \quad (3.46)$$

sendo que  $T_p$  é a temperatura da partícula do carvão (considerada uniforme),  $R$  é a constante do gás perfeito.  $E_v$  é a energia de ativação e  $A_v$  é o fator pré-exponencial. O parâmetro  $E_v$  é a sensibilidade de uma reação com relação à temperatura.  $E_v$  está relacionada com a probabilidade de que o choque entre as moléculas aconteça na reação, contudo não tem definição física direta. Na tese se assumiu os valores para o carvão Rhenish,  $E_v = 4,64 \times 10^7 \left[\frac{J}{kmol}\right]$  e  $A_v = 20.000 [s^{-1}]$  (CHEN, 2013).

### 3.4. Reação do Char

Após a etapa de desvolatilização, o material residual é o carbono residual, também conhecido como *char*. Este carbono poroso é passível de oxidação, quando não houver mais a presença de material volátil no *char*. Assim, o oxigênio consegue difundir através da superfície externa e no interior deste. A taxa de combustão do *char* depende de dois fatores: a taxa cinética de reação carbono-O<sub>2</sub> na superfície interna e a taxa de difusão interna do O<sub>2</sub>. A superfície do *char* também pode sofrer reações de gaseificação com H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>, o último em muito menor quantidade (KANGWANPONGPAN *et al.*, 2012). Portanto, o *char* possui reações heterogêneas, transformando elemento sólido em gasoso, além de serem reações simultâneas, equações (3.47), (3.48) e (3.49).



A oxidação do *char* é o processo mais lento entre as etapas de combustão, e a velocidade de reação heterogênea tem efeitos importantes na extensão da queima. A taxa de reação do *char* depende da (SIERRA, 2013):

- Concentração de O<sub>2</sub>;
- Temperatura do gás dos produtos de combustão;
- Dimensão da partícula do *char*;
- Porosidade do *char*;
- Número de Reynolds.

### 3.4.1. Modelos de oxidação do *char*

No ANSYS CFX, os dois modelos que existem para oxidação do *char* são: o de Field que utiliza reações globais de ordem unitária e Gibb que utiliza uma aproximação analítica simples da difusão do oxigênio dentro dos poros das partículas do *char*. Estes são os modelos que o ANSYS CFX possui e, que se equiparam aos modelos de reação de *char* do ANSYS FLUENT. As escolhas desses modelos se justificam por serem os melhores modelos para a oxidação de carvão pulverizado.

#### 3.4.1.1 Modelo Field

Neste caso, considera-se uma partícula de *char* esférica com uma camada de estagnação, em que o oxigênio deve se difundir antes de reagir com o *char*. A taxa de oxidação do *char* é limitada pela difusão do oxigênio para a superfície externa e pela taxa de reação química na superfície.

A taxa de difusão do oxigênio por área da superfície do *char* é fornecida por  $k_d(X_g - X_s)$ , onde  $X_g$  é a fração molar de oxigênio gasoso no forno distante da camada limite da partícula e  $X_s$  é a fração molar do oxigênio na superfície da partícula (ANSYS INC, 2013). O valor de  $k_d$  é dado por:

$$k_d = \frac{D_{ref}}{r_p} \left( \frac{T_p + T_g}{2T_{ref}} \right)^\alpha \frac{P_A}{P} \quad (3.50)$$

onde  $r_p$  é o raio da partícula,  $T_p$  é a temperatura da partícula,  $T_g$  é a temperatura do gás,  $P$  é a pressão local,  $P_A$  é a pressão atmosférica,  $D_{ref}$  é a difusividade dinâmica,  $T_{ref}$  é uma temperatura de referência igual a 293 [K] e  $\alpha$  é a exponencial igual a 0,75.

A taxa de oxidação por área da superfície do *char* é fornecida por  $k_c X_s$ , em que o coeficiente  $k_c$  para a taxa de reação química é mostrada na equação (3.51).

$$k_c = A_c T_p^n \exp\left(-\frac{T_c}{T_p}\right) \quad (3.51)$$

onde  $A_c$  e  $T_p$  estão sujeitos a classe do carvão, e são especificados como parâmetros de entrada,  $n$  tem o valor padrão definido no ANSYS CFX de 0,0.

Equacionada a taxa de difusão (3.50) e a de reação química (3.51), a taxa de reação global do *char* para uma partícula é mostrada pela equação a seguir:

$$\frac{dm_c}{dt} = (k_d^{-1} + k_c^{-1})^{-1} X_g 4\pi R_p^2 \frac{P}{P_A} \quad (3.52)$$

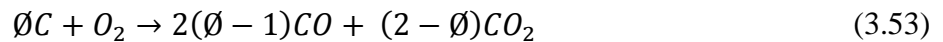
Sendo controlada pela menor taxa  $k_d$  e  $k_c$  (ANSYS INC, 2013).

### 3.4.1.2 Modelo Gibb

O modelo de Gibb considera (MEI *et al.*, 2010):

- A porosidade do *char* da partícula,  $\varepsilon$ ;
- A razão volume por superfície interna da partícula,  $a$ ;
- O coeficiente efetivo de difusão interna do oxigênio dentro do poro,  $D_p$ ;
- Razão molar dos átomos do carbono por moléculas de oxigênio,  $\emptyset$ .

O mecanismo de oxidação do carbono está de acordo com a equação (3.53).



O valor de  $\emptyset$  depende da temperatura da partícula  $T_p$ .

$$\frac{2(\emptyset - 1)}{(2 - \emptyset)} = A_s \exp \frac{T_s}{T_p} \quad (3.54)$$

onde as constantes de Gibb são  $A_s = 2500$  com  $T_s = 6240$  [K].

Da equação (3.55) determina-se a taxa de decréscimo da massa do *char*  $m_c$  (MEI *et al.*, 2010).

$$\frac{dm_c}{dt} = -\frac{3\varphi}{1-\varepsilon} \frac{M_c}{M_{O_2}} \frac{\rho_\infty}{\rho_c} (k_1^{-1} + (k_2 + k_3)^{-1})^{-1} m_c \quad (3.55)$$

onde  $\rho_\infty$  é a concentração de oxigênio no ambiente de referência através de cálculo na fase gasosa,  $\rho_c$  é a massa específica do carvão.

Os parâmetros  $k_1$ ,  $k_2$  e  $k_3$  são definidos como:

- $k_1$  é a taxa de difusão externa.

$$k_1 = \frac{D}{R_p^2} \quad (3.56)$$

onde  $D$  é o coeficiente de difusão externa do oxigênio no gás ao redor.

- $k_2$  é taxa de reação superficial.

$$k_2 = (1-\varepsilon) \frac{k_c}{R} \quad (3.57)$$

onde  $k_c$  a taxa de oxidação do carbono, definida pela equação de Arrhenius modificada.

$$k_c = A_c T_p \exp\left(-\frac{T_c}{T_p}\right) \quad (3.58)$$

Gibb recomenda como constantes os valores de  $A_c = 14 \left[\frac{m}{s}\right]$  e  $T_c = 21580 [K]$ .

- $k_3$  é a taxa de difusão interna e reação superficial.

$$k_3 = k_c \left( \frac{\beta \coth \beta - 1}{\beta^2 a} \right) \quad (3.59)$$

onde:

$$\beta = R \left( \frac{k_c}{D_p \varepsilon a} \right)^{0,5} \quad (3.60)$$

### 3.5. Modelos de Combustão (Interação Combustão-Turbulência)

A combustão é regida pelo escoamento e reação química onde está inserida. Um importante parâmetro adimensional na simulação numérica que analisa o processo de combustão é conhecido como Damköhler (Da) (CAVALCANTI, 2013):

$$Da = \frac{t_T}{t_Q} \quad (3.61)$$

onde compara tempo dos processos físicos ( $t_T$ ) e o tempo de reação química ( $t_Q$ ).

O coeficiente de Damköhler procura identificar quem domina o processo para escolha do modelo. Conseqüentemente, a condição turbulenta indica uma condição tal que  $Da \gg 1$ , modelo a ser utilizado é *eddy dissipation*; enquanto que  $Da \ll 1$  representa uma condição governada essencialmente pela cinética química, modelo a ser utilizado é *finite rate chemistry*. A Figura 3.3 mostra os modelos de combustão, encontrados no ANSYS, em função do número de Damköhler e do grau de relevância, dessa forma sugerindo o melhor modelo de combustão a se trabalhar.

No presente trabalho, para o regime de oxi-combustão de carvão pulverizado, o modelo de combustão utilizado é advindo de verificação da revisão bibliográfica e da tese que possui informações do forno, o qual realizou-se a validação (KANGWANPONGPAN, 2013). Nesta avaliação dos modelos observou-se que o modelo *eddy dissipation / finite rate chemistry model* (EDFR) é o mais recomendável para a combustão difusa. Ou seja, analisando os modelos na Figura 3.3, o número de Damköhler que é trabalhado, é maior que 1. Dessa forma, o tempo de reação deve ser menor do que o tempo de turbulência em algumas regiões. Em outras regiões trabalha-se com  $Da \ll 1$ , ou seja, o tempo de reação é maior.

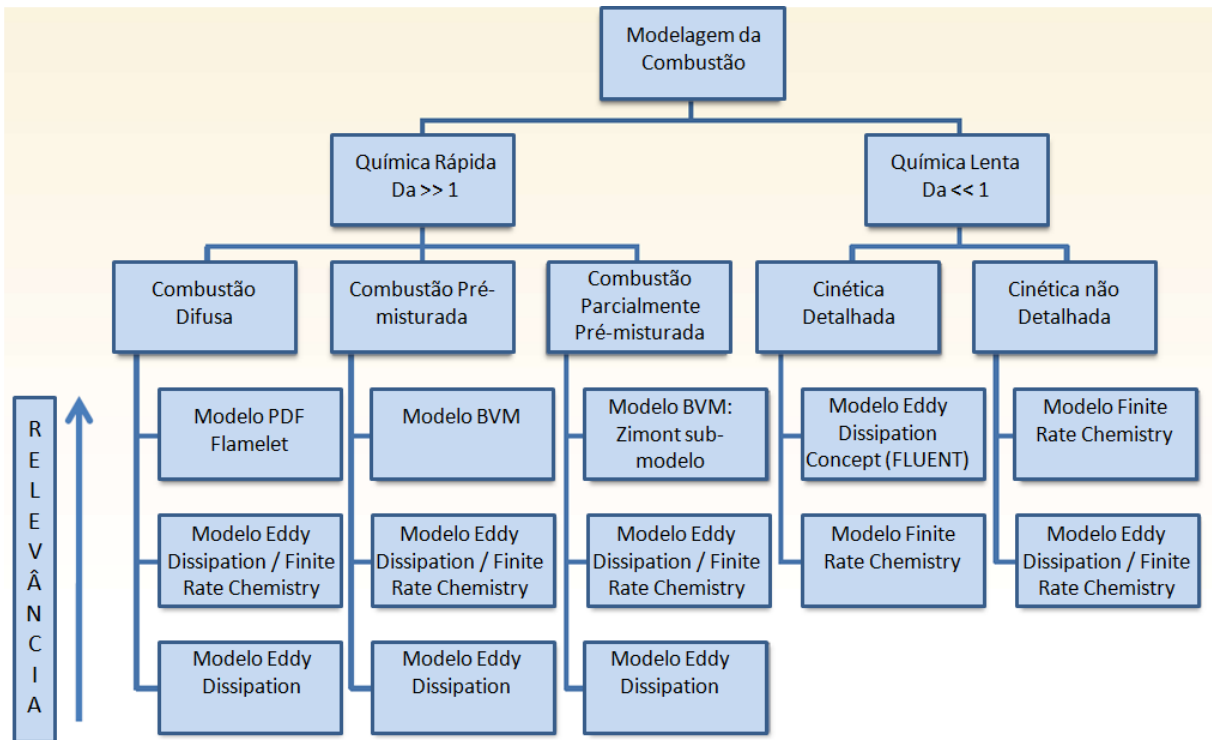


Figura 3.3 – Modelos de combustão disponíveis no ANSYS (ANSYS INC, 2013).

### 3.5.1. Modelo Eddy Dissipation (ED)

No modelo *eddy dissipation* (ED) tem-se,  $Da \gg 1$ , ou seja, o tempo da mistura turbulenta é que efetivamente limita a velocidade do processo de combustão, que é o que ocorre na combustão do forno, chama difusa ou sem pré-mistura. Portanto, quando se usa este modelo a combustão deve ser controlada pelo processo de mistura e, as taxas de cinética química podem ser desprezadas.

O modelo de *eddy dissipation* (ED) é um modelo de reação de química turbulenta. Nas chamas não pré-misturadas, a turbulência lentamente converte o combustível e o oxidante para as zonas de reação onde eles são queimados rapidamente. Nas chamas pré-misturadas, a turbulência lentamente mistura reagentes frios e produtos quentes nas zonas de reação, onde a reação ocorre rapidamente. O reagente precisa de algum tempo para chegar à temperatura de ignição da combustão. Isto é uma deficiência deste modelo.

O modelo adota a taxa de produção de uma espécie química  $n$  segundo uma reação  $k$  como um valor mínimo obtido entre as expressões:

$$R_k = A \frac{\varepsilon}{K} \left( \frac{[I]}{v'_{kl}} \right) \quad (3.62)$$

onde  $[I]$  representa a concentração molar dos componentes reagentes e  $v'_{kl}$  o coeficiente estequiométrico para os reagentes  $I$  (ANSYS INC, 2013).

$$R_k = AB \frac{\varepsilon}{K} \left( \frac{\sum_p [I] W_I}{\sum_p v'_{kl} W_I} \right) \quad (3.63)$$

onde  $P$  representa todos os componentes do produto na reação elementar  $k$  (ANSYS INC, 2013).

As constantes A e B são constantes empíricas do modelo e assumem os valores de  $A = 4,0$  e  $B = 5,0$ .

Nas equações (3.62) e (3.63) as taxas de produção de espécie química  $n$  são governadas pela turbulência,  $\varepsilon/k$  (energia de dissipação/ energia cinética turbulenta), nas quais a combustão ocorre onde o escoamento é turbulento (ANSYS INC, 2013).

Este modelo possui a adversidade que todas as reações têm a mesma taxa turbulenta segundo o modelo de Arrhenius. Dessa forma consegue-se utilizar mecanismos globais de reação (um passo) ou com uma espécie intermediária (dois passos). Um outro problema que surge relaciona-se com o processo de combustão que apenas ocorre com a turbulência, ou seja, pode representar uma ignição prematura (PINHEIRO JÚNIOR, 2010).

### 3.5.2. Modelo Eddy Dissipation/Finite Rate Chemistry (EDFR)

O modelo combinado é usado para várias configurações turbulentas. O número de Damköhler varia de valores baixos para altos, ou seja, a química pode ser lenta até rápida em relação à escala de tempo turbulento. Portanto este modelo é utilizado para o caso em que a reação é turbulenta em determinada área e em outras regiões ela é limitada pela cinética química.



A taxa de reação efetiva, para o modelo combinado EDFR, é fornecida como obtida do mínimo valor do cálculo efetuado separadamente para ED e *finite rate chemistry* (FRC). Este procedimento é aplicado para cada passo de reação separadamente, assim de tal forma que enquanto alguns passos pode ser delimitados pela cinética química, em outros passos ela é delimitada pela mistura turbulenta ao mesmo tempo e local físico (ANSYS INC, 2013). Portanto, se descreve o modelo *FRC* para que possa ser compreendido o modelo EDFR, mas esse modelo não se usa no desenvolvimento do trabalho.

### 3.5.3. Modelo Finite Rate Chemistry (FRC)

A taxa de progresso da reação elementar  $k$  é equacionada da seguinte forma, Equação (3.64).

$$R_k = \left( F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} [I]^{r'_{kl}} - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} [I]^{r''_{kl}} \right) \quad (3.64)$$

onde  $[I]$  é a concentração molar do componente  $I$ , e  $F_k$  e  $B_k$  são constantes das taxas de reações direta e inversa respectivamente.  $r$  representa a ordem de reação do componente  $I$  na reação elementar  $k$ . Para reações elementares este valor é igual ao valor do coeficiente estequiométrico, porém pode ser alterado para algumas reações globais. Para  $F_k$  e  $B_k$  assume que são dependentes da temperatura de Arrhenius (ANSYS INC, 2013).

$$F_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (3.65)$$

e

$$B_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (3.66)$$

onde  $E_k$  é a energia de ativação,  $T$  é a temperatura absoluta,  $A_k$  é fator pré exponencial,  $\beta_k$  é o expoente da temperatura (adimensional) e  $R$  é a constante universal dos gases.

### 3.6. Modelo de Reações dos Voláteis

No processo de desvolatilização obtém-se os voláteis que são compostos de diversos hidrocarbonetos e gases (CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) que reagem posteriormente com o oxigênio. Os compostos hidrogenados podem ser apresentados da forma (C<sub>a</sub>H<sub>b</sub>O<sub>c</sub>) ou hidrocarboneto leve (C<sub>a</sub>H<sub>b</sub>), além de compreender outras substâncias elementares que forneceram reagentes como NO<sub>x</sub> e SO<sub>x</sub>. Dessa forma, o hidrocarboneto é modelado no CFD por C<sub>a</sub>H<sub>b</sub>O<sub>c</sub>N<sub>d</sub>Se. Dois modelos interferem na reação dos voláteis: o modelo de combustão e o modelo de simplificação da reação que define a reação dos voláteis. Os modelos de combustão gasosa determinam a taxa global de reação dos voláteis que são influenciados pelos efeitos da mistura de gases e da reação química. Porém, no processo de combustão ocorrem diversas reações químicas, e que se modeladas todas elas fornecem um tempo computacional muito grande. Por isso, da simplificação do número de reações consideradas.

Neste trabalho empregou-se o modelo de reação dos voláteis de 3 passos (KANGWANPONGPAN, 2013). O carbono na matéria volátil (VM) é queimado completamente resultando em CO e H<sub>2</sub>. Os produtos de combustão das primeiras reações de oxidações voláteis são compostos de CO e H<sub>2</sub> (sem CO<sub>2</sub>), equação (3.67). Outras reações subsequentes são as oxidações de CO e H<sub>2</sub> para formar CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O, equações (3.68) e (3.69), respectivamente. Os mecanismos de reação de 3 passos são apresentados por:



As reações de voláteis são fornecidas por vários autores. Cada autor apresenta a sua energia de ativação, fator pré-exponencial, expoente da temperatura do gás e a ordem de reação. As investigações dos parâmetros adequados para a oxi-combustão do forno de 100 kW estão apresentadas no capítulo 4, que mostra os melhores parâmetros para a cinética química da oxidação do VM, CO e H<sub>2</sub>.

### 3.7. Modelo de Radiação

A radiação possui duas características fundamentais, a natureza espectral e a natureza da direção. A natureza espectral faz com que a maioria dos corpos reais não absorva toda a radiação que incide sobre eles, pois esta possui vários comprimentos de onda e direções. A outra característica, a natureza direcional, distribui de forma não-linear a radiação emitida e refletida (BERGEL, A., 2007).

São feitas duas idealizações para a natureza espectral, a de corpo negro e a de corpo cinzento. O corpo negro é que absorve toda a radiação incidente, não importando o comprimento de onda e nem a direção. O corpo cinzento, os valores de absorvidade espectral e da emissividade espectral são independentes do comprimento de onda, ao longo das regiões espectrais de irradiação e de emissão.

A absorvidade é a razão entre a radiação absorvida pela superfície e a absorvida por um corpo negro, na mesma temperatura. A emissividade é a razão entre a radiação emitida pelo corpo e a radiação emitida de um corpo negro, na mesma temperatura (BERGEL, A., 2007). A idealização da direção supõe-se uma superfície difusa, ou seja, que emite a mesma intensidade de radiação em todas as direções. A intensidade de radiação, encontrado na equação do transporte por radiação, é derivada da distribuição da emissão de radiação por unidade de área emissora,  $dA$ . Além de ser quantificada com relação a direção da radiação,  $\theta$ , e por ângulo sólido nesta direção,  $\Omega$  (SILVA, 2015), conforme ilustrado na Figura 3.4.

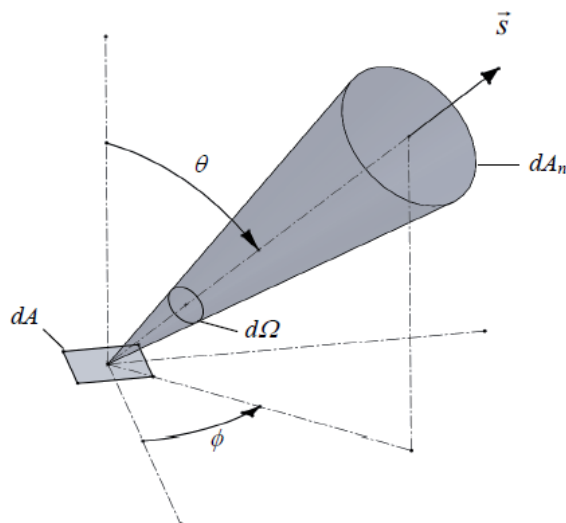


Figura 3.4 - Intensidade da radiação e os parâmetros que afetam (SILVA, 2015).

Assim, tem-se que a intensidade de radiação é dada pela equação (3.70).

$$dI_\nu(x, y, z, \theta, \phi) = dI_\nu(\vec{r}, \vec{s}) = \frac{dQ}{dA \cos\theta d\Omega} \quad (3.70)$$

A equação (3.71) descreve o transporte por radiação do calor absorvido, emitido, temperatura absoluta local e o *scattering*.

$$\frac{dI_\nu(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = \left( - (K_{av} + K_{sv}) I_\nu(\vec{r}, \vec{s}) + K_{av} I_b(\nu, T) + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int_{4\pi} dI_\nu(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' + S^{rad} \right) \quad (3.71)$$

onde  $\nu$  é a frequência;  $\vec{r}$  é o vetor posição;  $\vec{s}$  é o vetor direção;  $s$  é o comprimento de caminho percorrido;  $K_a$  é o coeficiente de absorção;  $K_s$  é o coeficiente de espalhamento (*scattering*);  $I_b$  é a intensidade de emissão de corpo negro;  $I_\nu$  é a intensidade de radiação espectral;  $T$  é a temperatura absoluta local;  $\Omega$  é o ângulo sólido;  $\Phi$  função de fase e  $S^{rad}$  termo fonte de intensidade de radiação. A atenuação pela absorção está representada pelo primeiro termo da equação, o segundo representa a emissão e o último termo indica o espalhamento devido ao ângulo sólido (RONCHETTI, 2008).

Como a equação de transporte por radiação possui coordenadas espaciais,  $\vec{r}$ , coordenadas locais,  $s$ , e a frequência,  $\nu$ , a solução da equação exige um tempo computacional muito grande. Por esta razão, a existência de modelos de radiação para aproximar as dependências direcionais e espectrais. Os escoamentos de fluidos de interesse prático ocorrem em situações em que o fluido e os limites envolventes estão quentes. Um ambiente típico onde a radiação desempenha um papel significativo é o forno. Para casos gerais, desde as regiões opticamente finas (transparentes) até opticamente grossas (difusão), como a combustão, os modelos de *Discrete Transfer* e Monte Carlo representam com mais precisão a solução da equação de transferência radiativa (ANSYS INC, 2013). O capítulo 3 sugere as opções em que o ANSYS CFX fornece a modelagem da radiação. Porém nesse trabalho utilizou-se o modelo *Discrete Transfer Model* (DTM) e Monte Carlo (MC), para modelagem do meio gasoso e das partículas, respectivamente.

### 3.7.1. Modelo Discret Transfer (DTM)

O princípio deste modelo é concebido pelo fato de que o fluxo de calor por radiação pode ser reduzido ou aumentado pela absorção e a emissão no meio em que incide (CAVALCANTI, 2013).

No âmbito de validar-se a simulação numérica, utiliza-se a mesma ponderação, em que o espalhamento é isotrópico. Dessa maneira, o modelo que melhor se adequa no ANSYS CFX a este caso é o DTM.

Na equação (3.72) é considerado um sistema homogêneo.

$$I_v(\vec{r}, \vec{s}) = I_{v0} \exp(-(K_{av} + K_{sv})s) + I_{bv}(1 - \exp(-K_a S)) + K_{sv} \bar{I}_v \quad (3.72)$$

onde  $I_{v0}$  é a intensidade radiativa que sai da fronteira e  $I_v$  é a intensidade de radiação média.

Em seguida, integra-se sobre o ângulo sólido em pontos discretos para se obter a radiação incidente espectral e o fluxo de calor radiativo e, usa-se a suposição de homogeneidade para estender a solução a todo o domínio. Como o objetivo da modelagem da radiação térmica é obter a absorção volumétrica total e emissão, cálculos adicionais ainda são necessários (ANSYS INC, 2013).

Este modelo possui a capacidade de melhoria do resultado com apenas o aumento do número de raios na configuração do pré-processamento (EDGE *et al.*, 2011b).

### 3.7.2. Modelo P1

O P1 é um modelo que implica grande esforço para a simulação, pois exige maior tempo computacional ou máquinas mais potentes para a realização da mesma simulação, ao mesmo tempo. Isso é devido ao modelo P1 que traz consigo uma equação a mais de transporte. Mas mesmo assim, devido a este modelo ser pesado, tem-se mostrado eficiente em combustíveis pulverizados de chamas que ocorrem longe de sua vizinhança (ANSYS INC, 2013).

A simplificação da equação de transporte de radiação fornece o modelo P1, na qual assume que a intensidade de radiação é isotrópica ou direção independente em uma determinada localização do espaço. O limite de difusão para um meio de emissão, absorção e dispersão do fluxo de calor radiativo espectral pode ser modelado da seguinte forma da equação (3.73).

$$q_{rv} = -\frac{1}{3(k_{av} - k_{sv}) - Ak_{sv}} \nabla G_v \quad (3.73)$$

Substituindo a equação (3.74) na equação de transporte radiativo, tem-se:

$$\nabla \left( \frac{1}{3(k_{av} - k_{sv}) - Ak_{sv}} \right) \nabla G_v = k_{av}(G_v - 4E_{bv}) \quad (3.74)$$

onde  $A$  é o coeficiente anisotrópico,  $G_v$  é radiação incidente espectral,  $E_{bv}$  é a emissão total do corpo negro.

No ANSYS CFX o uso do modelo P1 admite apenas paredes difusas opacas, ou seja, não se utiliza frações difusas. E nas regiões de aberturas como entradas e saídas, a condição é de total transparência, isto é, toda a energia que sai é absorvida e computada como um corpo negro em função da temperatura estipulada pela simulação ou fornecido pelo usuário (ANSYS INC, 2013).

### 3.7.3. Modelo Monte Carlo (MC)

O princípio do modelo de Monte Carlo se baseia na interação de fótons com o meio ambiente. Os fótons são emitidos de uma fonte e rastreado até que a sua massa diminua ao mínimo, assim permanecendo em um determinado local. Cada vez que o fóton experimenta um movimento, dispersão ou absorção, por exemplo, são atualizadas as características físicas (ANSYS INC, 2013). Quando estes fótons entram em contato com a superfície, eles são refletidos ou absorvidos. As fontes de fótons são determinadas pela energia de emissão. Cada elemento de volume do fóton afeta a absorção e a dispersão (MIKULKA *et al.*, 2010).

A equação da transferência de calor por radiação desse modelo é a mesma descrita pelo DTM, equação (3.72).

No modelo Monte Carlo, contrário ao modelo P1, é um método muito preciso, porém tem um alto custo computacional (EDGE *et al.*, 2011b). No ANSYS CFX esse modelo é o único que pode ser empregado nas partículas do carvão mineral.

### 3.8. Metodologia Empregada na Simulação Numérica da Oxi-Combustão

Após realizar uma revisão bibliográfica dos trabalhos relativos ao carvão mineral pulverizado e o processo de oxi-combustão, os modelos de turbulência, combustão e radiação apresentados na Tabela 3.2, podem ser aplicados na simulação em CFD, resultando em boa concordância com os resultados experimentais da oxi-combustão.

Neste trabalho, o foco é utilizar estes modelos para simular a oxi-combustão do carvão mineral brasileiro em um forno existente e, não desenvolver novos modelos que produzam resultados ainda melhores que os existentes na literatura.

Tabela 3.2 – Descrição dos modelos que foram selecionados na oxi-combustão do forno de 100 kW. Modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Modelos               | Descrições de estudo   |
|-----------------------|--|
| Turbulência           | k- $\epsilon$ padrão   |
|                       | RNG padrão   |
|                       | <i>Realized k-<math>\epsilon</math></i>                                    |
|                       | SST  |
|                       | RSM  |
| Reação do <i>char</i> | Modelo de taxa de reação global  |
|                       | Taxa de difusão cinética limitada  |
|                       | Taxa de reação intrínseca  |
|                       | Poros para área de superfície interna                                      |
|                       | <i>Char com/sem CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O</i>                        |
| Reação do Volátil     | Modelo de dissipação viscosa de (EDM)                                      |
|                       | Modelo Taxa Finita/ Dissipação Viscosa de (FRED)                           |
|                       | Taxa cinética para a oxidação de volátil (2 e 3 passos)                    |
|                       | Mecanismo de reação global (2 e 3 passos)                                  |
|                       | Efeito de incluir a reação reversível do CO (2 e 3 passos)                 |
|                       | Comparação dos resultados obtidos com reversibilidade do CO (2 e 3 passos) |
| Radiação da partícula | Constante de emissividade (espalhamento)                                   |
|                       | Sem-espalhamento das cinzas  |
|                       | Sem radiação de partículas   |
| Radiação do gás       | Modelo WSGG utilizado por diversos autores                                 |

Kangwanpongpan (2013) em seu trabalho de oxi-combustão aplicada ao carvão mineral pulverizado desenvolveu a simulação numérica com o uso do programa computacional ANSYS

FLUENT. Os modelos utilizados pelo autor estão apresentados na Tabela 3.2 e foram testados e comparados com experimentos da oxí-combustão realizados por Toporov *et al.* (2008).

Para simular no ANSYS CFX a oxí-combustão, foi feita uma equivalência dos modelos do ANSYS FLUENT, seguindo a avaliação de cada um dos modelos empregado por Kangwanpongpan (2013) e os modelos disponíveis no ANSYS CFX. O resultado desta análise está apresentado na Tabela 3.3 e os mesmos foram utilizados na simulação do presente trabalho.

Tabela 3.3 – Modelos utilizados na simulação numérica para validação do experimento em ANSYS CFX.

| Modelos               |                     |
|-----------------------|---------------------|
| Turbulência           | k-ε padrão          |
|                       | SST                 |
| Desvolatilização      | Badzioch e Hawksley |
| Reação do <i>char</i> | Field               |
| Reações dos voláteis  | (Diversos autores)  |
| Combustão             | EDFR                |
| Radiação              | DTM                 |
|                       | MC                  |

Com a seleção dos modelos que foram analisados, no capítulo 4, realizou-se a validação empregando-se os modelos da Tabela 3.3 juntamente com os ajustes necessários para uma melhor concordância com o experimento de Toporov *et al.* (2008). No capítulo 5 efetuou-se a análise do carvão mineral brasileiro, utilizando-se os mesmos modelos com os ajustes termoquímicos necessários para as características físico-química do tipo de carvão mineral escolhido.



## Capítulo 4

# VALIDAÇÃO DOS MODELOS UTILIZADOS NO CFX

Neste capítulo realizou-se a validação dos modelos selecionados durante a revisão bibliográfica para analisar a simulação numérica em CFD através do ANSYS CFX, de tal modo a representar os fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos do escoamento dos gases e partículas. O escoamento que se analisou foi quando ocorreu o processo de oxidação do carvão mineral pulverizado em um forno.

As simulações realizaram-se no *cluster* LABSIM, do grupo GETEC/IEM, da UNIFEI, *campus* de Itajubá, estruturado em 9 servidores do tipo x86, contendo em cada servidor um número de núcleos de processamento com quantidade de *gigabyte* [GB] de memória RAM, conforme descrito na Tabela 4.1.

O experimento selecionado, a malha, e todos os dados empregados no ANSYS CFX, são descritos neste capítulo, bem como os resultados da simulação numérica são validados com o experimento de Toporov *et al.* (2008). O forno é vertical de queda livre de 100 kW com os modelos de turbulência, combustão e radiação. A investigação e análise do experimento utilizando simulação numérica em CFD foi feito por Toporov *et al.* (2008), Kangwanpongpan (2013) e Warzecha e Boguslawski (2014a).

Tabela 4.1 – Descrição do cluster utilizado para as simulações.

| Nome da máquina       | Número de núcleos de processamento | Memória RAM [GB] |
|-----------------------|------------------------------------|------------------|
| LABSIM (Nó principal) | 32                                 | 128              |
| NO01                  | 40                                 | 64               |
| NO02                  | 40                                 | 64               |
| NO03                  | 40                                 | 64               |
| NO04                  | 8                                  | 16               |
| NO05                  | 8                                  | 16               |
| NO06                  | 8                                  | 16               |
| NO07                  | 8                                  | 16               |
| NO08                  | 8                                  | 16               |

Os resultados da validação da oxi-combustão do carvão Rhenish pulverizado foram feitos nas distâncias axiais do queimador 0,025 [m], 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m]. Os resultados são apresentados na forma da velocidade axial, temperatura e fração volumétrica de O<sub>2</sub> ao longo de cada raio. Foram obtidos os campos de velocidade e temperatura.

## 4.1. Geometria e Funcionamento do Experimento

O processo de validação foi realizado com a geometria e as condições de contorno do experimento realizado com o carvão úmido alemão linhito pulverizado, denominado Rhenish, no forno vertical de 100 kW<sub>th</sub>, da Universidade de Aachen. (TOPOROV *et al.*, 2008).

O forno de Aachen utilizou o tipo de carvão pulverizado em queda livre. Este forno tem 2,1 [m] de altura e 0,2 [m] de raio interno, como mostrado na Figura 4.1. A geometria possui 4 entradas para escoar dentro do forno, elas estão distribuídas no topo do queimador e do forno. No topo do forno colocou-se um queimador, que têm duas entradas, Figura 4.2. A primeira entrada (PS) do queimador injeta-se carvão pulverizado mais uma mistura gasosa de O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> e na segunda entrada (SS) uma mistura gasosa de O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> com *swirl*, que é criado pelas aletas dessa entrada. Também, existe a terceira entrada (TS) e o *staging* que estão localizados no topo

do forno, Figura 4.2. Estas quatro entradas são anulares, suas dimensões e localização estão mostradas na Figura 4.2. Todas estas entradas possuem uma mistura gasosa de  $O_2$  e  $CO_2$ , Tabela 4.2.

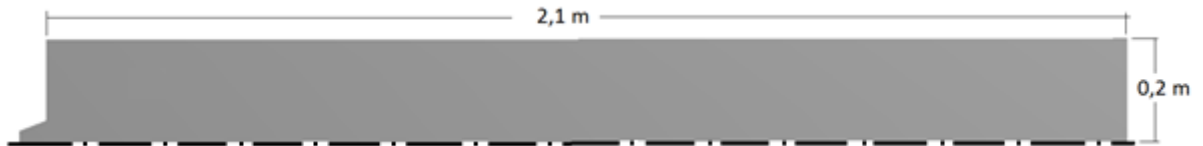


Figura 4.1 – Geometria da seção transversal de um quarto do forno, visão geral, modificado de Warzecha e Boguslawski (2014).

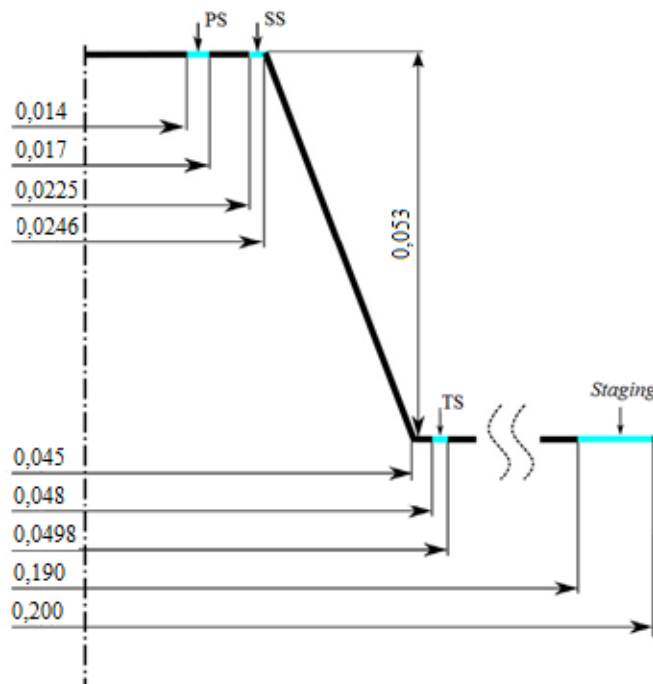


Figura 4.2 – Geometria do queimador, dimensões da entrada em m, modificado de Warzecha e Boguslawski (2014).

Tabela 4.2 – Fração volumétrica de  $O_2$  e  $CO_2$  em cada entrada, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Entrada | $O_2$ [% volume] | $CO_2$ [% volume] |
|---------|------------------|-------------------|
| PS      | 19               | 81                |
| SS      | 21               | 79                |
| TS      | 21               | 79                |
| Staging | 21               | 79                |

## 4.2. Preparação da Geometria para Simulação

Com o objetivo de reduzir o tempo computacional e onde existe uma simetria no forno selecionado, utilizou-se para a simulação a seção de um quarto do forno, como mostrado na Figura 4.3, desenvolvida em *Solidworks*. Dessa forma as paredes de corte são consideradas periódicas circulares, ou seja, estas paredes têm propriedades repetitivas de 90 em 90°, com relação ao eixo axial do forno.

O forno foi segmentado em várias partes com a finalidade de facilitar a criação da malha em cada região. As partes que foram criadas são: queimador interno; corrente primária (PS); queimador externo; corrente secundária (SS); *quarl*; estas são as partes que constituem a região do queimador. O forno é constituído pelo forno interno; corrente terciária (TS); região entre o forno interno e a terciária; forno externo; *staging*. Cada uma destas partes é mostrada na Figura 4.3.

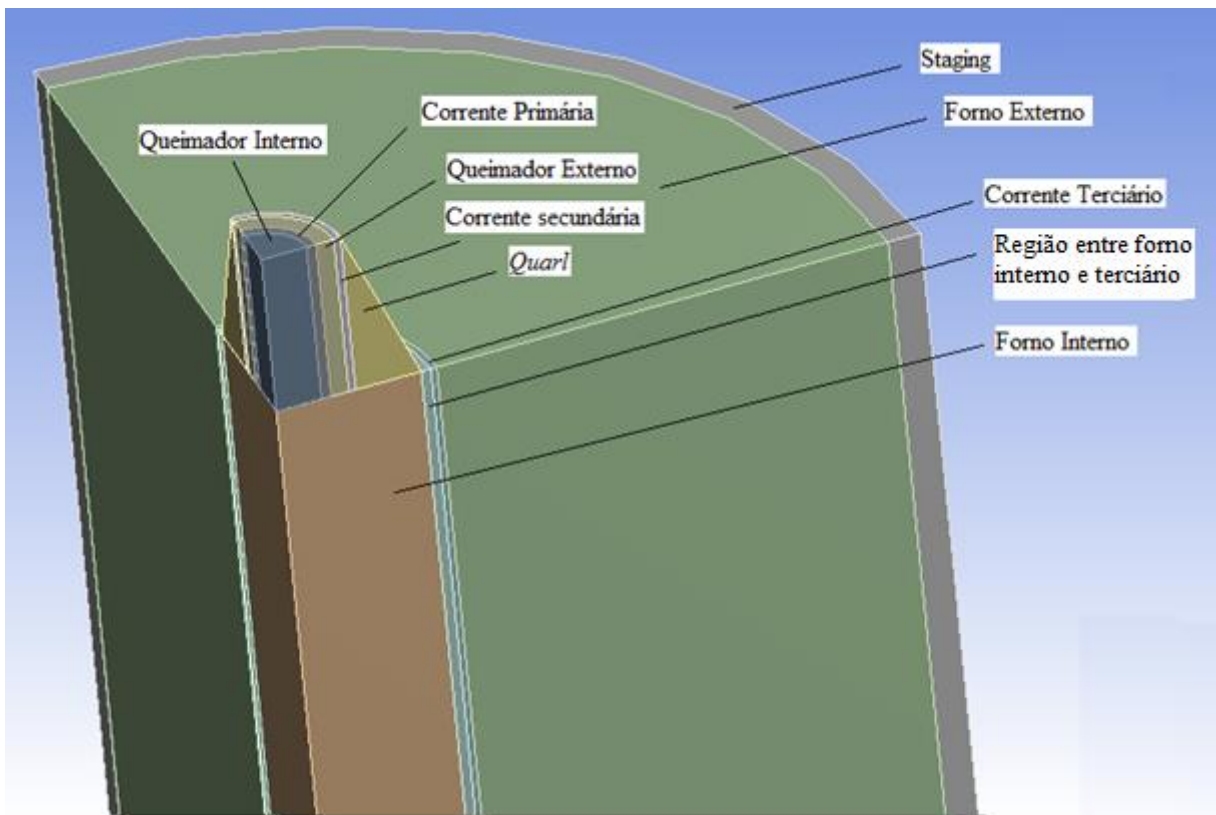


Figura 4.3 – Nomenclatura das partes do forno criado em Solidworks.

### 4.3. Malha Computacional

Após a construção da geometria do forno de 100 kW, com o uso das dimensões internas do forno foi criada a malha. A malha foi criada no programa *Meshing*, da ANSYS. Utilizou-se uma malha em torno de 1.827.000 elementos e 1.952.326 nós para a simulação dos modelos. A maior parte dos elementos empregados nas malhas são hexaédricos. A escolha deste elemento foi baseada no trabalho de Kangwanpongpan (2013), que relatou bons resultados da simulação numérica com este tipo de estrutura de malha.

A segmentação do forno em várias partes teve como objetivo a criação de malhas com diferentes refinamentos de forma a obter o refino de interesse em cada região. A malha é uniforme na altura do forno e possui um melhor refinamento nas seções de entradas e no queimador, como mostra nas Figuras 4.4 e 4.5.

As características da independência de malhas empregadas no trabalho não foram realizadas visto que foram avaliadas no trabalho de Kangwanpongpan (2013). No trabalho de Kangwanpongpan (2013) realizou-se a independência de malha com 100.000, 300.000 e 600.000, elementos considerando um quarto do mesmo forno estudado. Observou-se que com a estrutura hexaédrica são mínimas as diferenças de resultados entre 300.000 e 600.0000 elementos. Dessa forma, garante-se que a malha construída no presente trabalho, está dentro da independência de malha feita por Kangwanpongpan (2013).

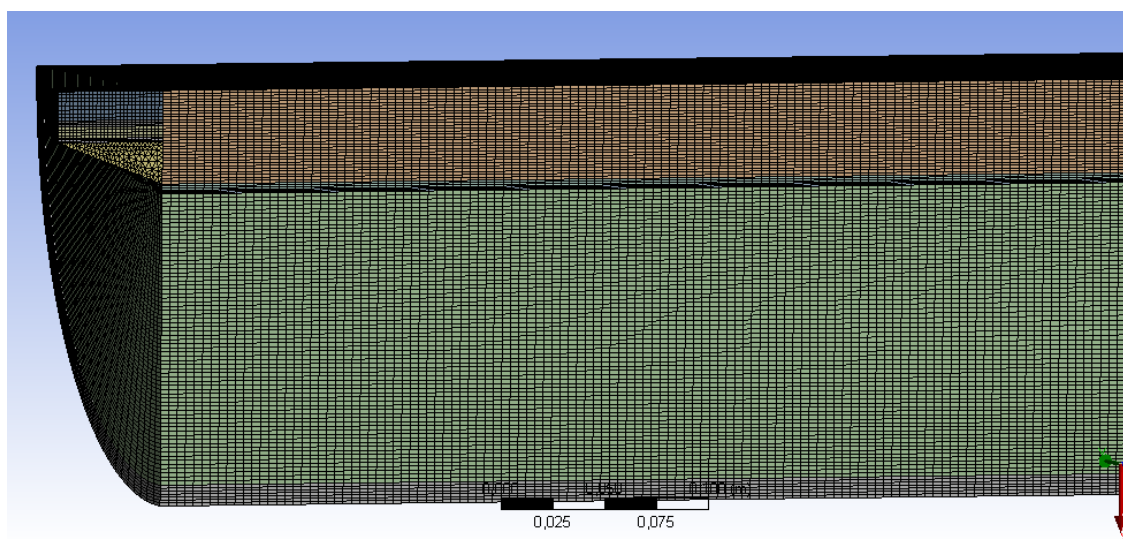


Figura 4.4 – Vista da malha do forno.

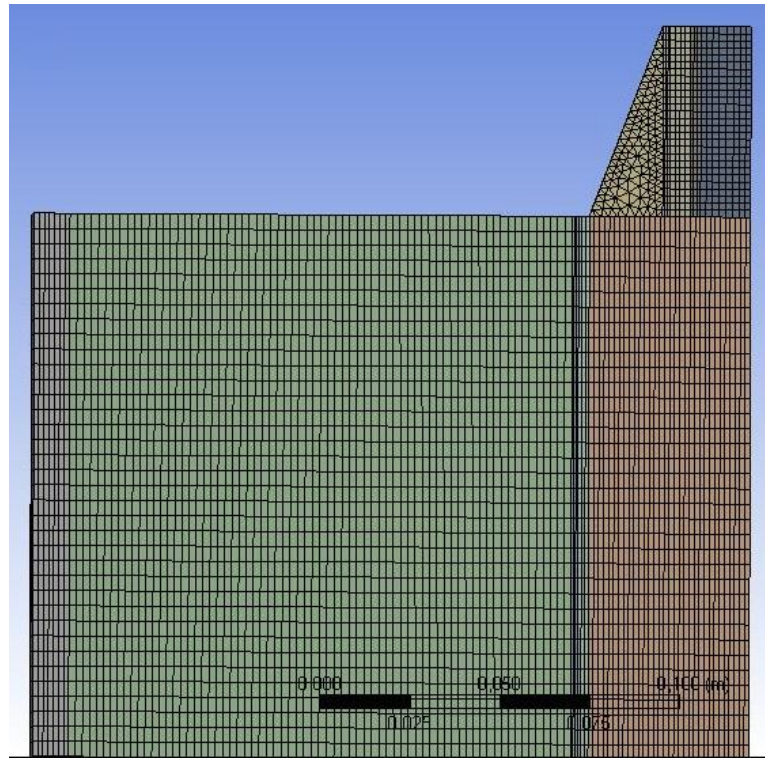


Figura 4.5 – Vista periódica da malha do forno.

Além disso, fez-se a avaliação da qualidade da malha gerada, por meio das informações métricas da mesma. Após a geração da malha, a visualização da informação é feita através das seguintes opções de qualidade de malha: *Jacobian Ratio (corner nodes, MAPDL e Gauss)*, *skewnees*, *characteristic length* e qualidade ortogonal. A Tabela 4.3 mostram os valores mínimos, máximos, médios e desvios padrões da qualidade de malha.

Tabela 4.3 – Valores de vários métodos da qualidade das malhas.

| Opção                                | Mínimo                  | Máximo                  | Médio                   | Desvio Padrão           |
|--------------------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| <i>Jacobian Ratio (corner nodes)</i> | 0,39669                 | 1                       | 0,95674                 | 0,067777                |
| <i>Jacobian Ratio (MAPDL)</i>        | 1                       | 2,5208                  | 1,0533                  | 0,11737                 |
| <i>Jacobian Ratio (Gauss)</i>        | -1                      | 0,99588                 | 0,94574                 | 0,23827                 |
| <i>Skewness</i>                      | 0,013127                | 0,95714                 | 0,025997                | 0,094351                |
| <i>Characteristic length [m]</i>     | $1,0339 \times 10^{-5}$ | $1,1027 \times 10^{-3}$ | $4,9253 \times 10^{-4}$ | $2,5474 \times 10^{-4}$ |
| Qualidade Ortogonal                  | 0,08955                 | 1                       | 0,98397                 | 0,10186                 |

Valores de Skewness entre 0,75 e 1 tem qualidade de célula ruim, de 0,25 a 0,75 são células boas e de 0 a 0,25 são células excelentes. A *Characteristic length* é usado para computar o *time step* que deve ser utilizado. A qualidade ortogonal deve estar entre 0 e 1, onde 0 é o pior valor e 1 é o melhor valor. *Jacobian Ratio (corner nodes)* e *Jacobian Ratio (gauss)* mede a qualidade do elemento que está limitado entre -1 (elementos ruins) e 1 (elementos bons). O *Jacobian Ratio (MAPDL)* deve ter valores próximo de 1 para ser considerados elementos bons.

#### 4.4. Dados Operacionais do Experimento

A corrente primária, PS, é uma mistura de gases  $O_2$  e  $CO_2$  mais a adição do carvão pulverizado. Na entrada da corrente secundária, SS, do queimador, o escoamento tem uma mistura de diferentes concentrações de gases  $O_2$  e  $CO_2$  (Tabela 4.2) além de gerar um *swirl*, cujos parâmetros utilizados no trabalho estão na Tabela 4.4. Uma corrente terciária é injetada em uma seção anular próxima à base do queimador, na saída do *quarl*, com baixa vazão mássica, Tabela 4.5. A Tabela 4.5 mostra as vazões mássicas de  $\frac{1}{4}$  do forno, pois esta é a geometria da seção transversal considerada para as simulações, como apresentada no item 4.2. A última injeção de gases fica localizada na área mais extrema do forno, com o propósito principal de reduzir a quantidade de gases injetada nas outras entradas, assim reduz-se a velocidade axial e mantém a mistura rica no queimador, Tabela 4.5 (Chen, 2013).

As misturas gasosas de  $CO_2$  e  $O_2$  são iguais nas correntes secundária, SS, terciária, TS, e corrente *staging*. As condições de contorno utilizadas no experimento para o forno e inseridos no ANSYS CFX estão nas Tabelas 4.2, 4.4 a 4.6.

Tabela 4.4 - Parâmetros utilizados para a geração do *swirl* no forno vertical de 100 kW<sub>th</sub>, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Parâmetro              | Valor [-] |
|------------------------|-----------|
| Número do <i>Swirl</i> | 1,2       |
| Componente Axial       | 0,624     |
| Componente Theta       | 0,782     |

Tabela 4.5 - Parâmetros de corrente de entrada utilizados no forno vertical de 100 kW<sub>th</sub>, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Entradas       | ¼ da Vazão<br>Mássica [kg/s] | Temperatura<br>[K] |
|----------------|------------------------------|--------------------|
| Carvão         | 0,0004514                    | 313                |
| PS             | 0,0012222                    | 313                |
| SS             | 0,0018472                    | 333                |
| TS             | 0,0001042                    | 333                |
| <i>Staging</i> | 0,0038125                    | 1173               |

Tabela 4.6 - Parâmetros utilizados nas paredes do forno vertical de 100 kW, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Parede        | Tipo                  | Temperatura<br>[K] | Emissividade<br>[-] |
|---------------|-----------------------|--------------------|---------------------|
| <i>Quarl</i>  | Adiabático            | -                  | 1                   |
| Topo do forno | Temperatura Constante | 573                | 0,2                 |
| Forno         | Temperatura Constante | 1273               | 0,7                 |

Além disso, tem-se alguns parâmetros usados como dados de entrada do ANSYS CFX. Estes parâmetros são diâmetro hidráulico ( $D_h$ ), intensidade turbulenta ( $I_{turb}$ ) e *eddy length scale* (L). Os valores são obtidos do trabalho de Kangwanpongpan (2013) e apresentados na Tabela 4.7.

Tabela 4.7 – Parâmetros pré-calculados utilizados como dados de entrada no ANSYS CFX, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Correntes      | $D_h$  | $I_{turb}$ | L                      |
|----------------|--------|------------|------------------------|
| Unidade        | [m]    | [%]        | [m]                    |
| PS             | 0,0013 | 6,51       | $4,94 \times 10^{-5}$  |
| SS             | 0,0010 | 6,51       | $3,80 \times 10^{-5}$  |
| TS             | 0,0009 | 10,18      | $3,42 \times 10^{-5}$  |
| <i>Staging</i> | 0,0048 | 8,74       | $1,824 \times 10^{-4}$ |
| Saída          | 0,0440 | 7,96       | $1,672 \times 10^{-3}$ |



As propriedades físico químicas do carvão alemão linhito Rhenish utilizado no experimento, estão mostradas na Tabela 4.8. O tamanho da partícula do carvão mineral pulverizado é de 35 [ $\mu\text{m}$ ], obtido com a distribuição *Rosin Rammler*. Além disso, o valor utilizado para o coeficiente de espalhamento (*scattering*) do carvão bruto é de 0,6 (KANGWANPONGPAN, 2013). Todos estes valores também são inseridos no ANSYS CFX.

Tabela 4.8 – Propriedades do carvão mineral linhito Renish ensaiado, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Propriedades do Carvão Rhenish (% massa) |       |
|--|-------|
| Análise imediata                         |       |
| Carbono                                  | 40,9  |
| Matéria Volátil                          | 46,6  |
| Cinzas                                   | 4,1   |
| Umidade                                  | 8,4   |
| Poder Calorífico Inferior (MJ/kg)        | 22,17 |
| Análise elementar                        |       |
| C  | 67,4  |
| H  | 4,24  |
| O  | 14,7  |
| N  | 0,86  |
| S  | 0,3   |

Os parâmetros utilizados no ANSYS CFX para representar o mecanismo de um passo da desvolatilização dos voláteis para o carvão alemão Rhenish está mostrado na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 – Parâmetros usados no mecanismo de um passo da desvolatilização dos voláteis (CHEN, L., 2013).

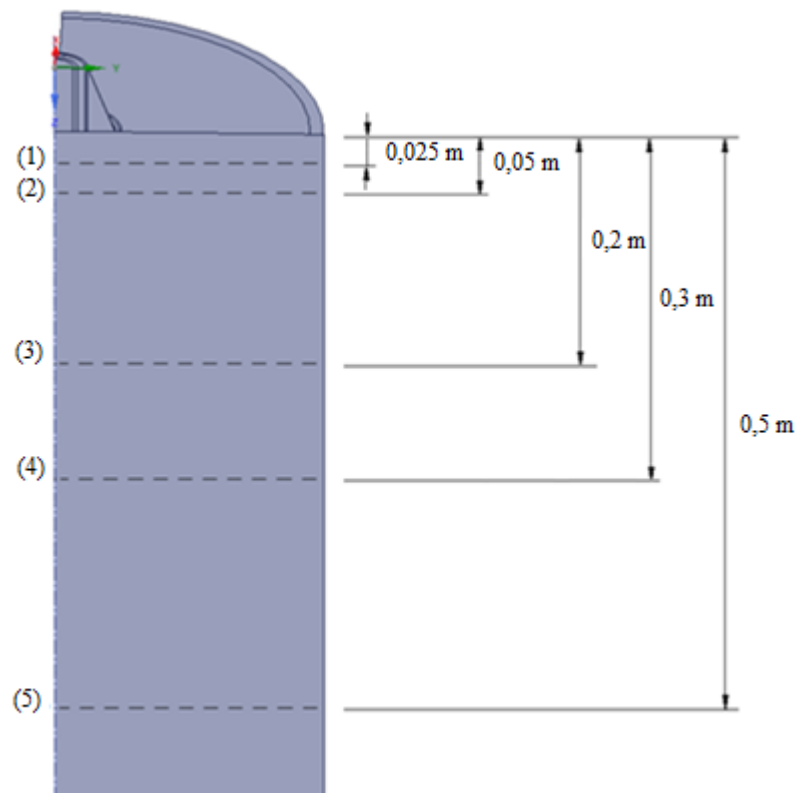
| Parâmetros de desvolatilização |                    | Unidade    |
|--------------------------------|--------------------|------------|
| $A_v$                          | $2,0 \times 10^4$  | $[s^{-1}]$ |
| $E_v$                          | $4,64 \times 10^7$ | $[J/kmol]$ |
| $T_{\text{máx}}$               | 3000               | $[K]$      |

Para a oxidação do *char* foram inseridos os seguintes parâmetros no CFX ANSYS, como mostrado na Tabela 4.10.

Tabela 4.10 – Parâmetros inseridos no ANSYS CFX para a oxidação do *char*.

| Reações                                    | $E_v$ [ $kg\ m^2\ s^{-1}$ ] | $A_v$ [ $J/mol$ ]  | $T_{máx}$ [ $K$ ] | Autores       |
|--|-----------------------------|--------------------|-------------------|---------------|
| $C_{(s)} + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$ | 0,005                       | $7,4 \times 10^4$  | 1650              | Field (1967)  |
| $C_{(s)} + CO_2 \rightarrow 2CO$           | 0,006361                    | $1,62 \times 10^5$ | 1650              | Mayer (1934a) |
| $C_{(s)} + H_2O \rightarrow CO + H_2$      | 0,00192                     | $1,47 \times 10^5$ | 1423              | Mayer (1934b) |

O posicionamento dos sensores de medidas de velocidade, temperatura e fração volumétrica de  $O_2$ , realizadas por Toporov *et al.* (2008), estão localizados nas distancias axiais que são mostrados pelas numerações da Figura 4.6. As medidas ao longo do raio para a velocidade axial foram realizadas nas posições axiais de (1), (2), (3) e (4). Enquanto que para as temperaturas e as frações volumétricas de  $O_2$  foram (2), (3), (4) e (5).

Figura 4.6 – Localização dos raios de medição no forno de 100 kW ensaiado por Toporov *et al.* (2008).

## 4.5. Modelos Matemáticos para a Simulação da Oxi-Combustão

Neste trabalho examinou-se vários modelos para a validação de oxi-combustão do forno de 100 kW com o uso do carvão alemão linhito, Rhenish. No capítulo 3, a Tabela 3.3 mostra os modelos utilizados no trabalho, com uma análise daqueles utilizados no ANSYS FLUENT e o correspondente no ANSYS CFX. A Tabela 3.3 fornece os tipos de modelos empregados na turbulência, desvolatilização, oxidação do *char*, reações dos voláteis, combustão e radiação. Investigou-se nas simulações, diferentes modelos de turbulência e de cinética química dos voláteis. Estes modelos foram implementados no programa computacional ANSYS CFX.

Os modelos de turbulência testados são k- $\epsilon$  padrão e SST, enquanto testou-se reações de 3 passos na cinética química dos voláteis utilizando o modelo de combustão EDFR: oxidação do material volátil (VM), oxidação do monóxido de carbono (CO) e oxidação do hidrogênio (H<sub>2</sub>). A Tabela 4.11 fornece a combinação de 6 casos de modelos de cinética dos voláteis investigados. As reações da Tabela 4.11 estão referenciados pelos autores, os quais propuseram as cinética química (KANGWANPONGPAN, 2013).

Tabela 4.11 – Os autores que investigaram as reações dos voláteis de 3 passos com o modelo EDFR.

| Caso | Autores que investigaram a cinética química |                                |                                |
|------|---|--------------------------------|--------------------------------|
|      | VM  | CO                             | H <sub>2</sub>                 |
| 1    | Zimont <i>et al.</i> , (1969)               | Howard <i>et al.</i> , (1973)  | Rückert <i>et al.</i> , (2003) |
| 2    | Zimont <i>et al.</i> , (1969)               | Rückert <i>et al.</i> , (2003) | Rückert <i>et al.</i> , (2003) |
| 3    | Rückert <i>et al.</i> , (2003)              | Howard <i>et al.</i> , (1973)  | Rückert <i>et al.</i> , (2003) |
| 4    | Rückert <i>et al.</i> , (2003)              | Rückert <i>et al.</i> , (2003) | Rückert <i>et al.</i> , (2003) |
| 5    | Shaw <i>et al.</i> , (1991)                 | Howard <i>et al.</i> , (1973)  | Rückert <i>et al.</i> , (2003) |
| 6    | Shaw <i>et al.</i> , (1991)                 | Rückert <i>et al.</i> , (2003) | Rückert <i>et al.</i> , (2003) |

A Tabela 4.12 mostra os parâmetros da cinética química adotados por cada um dos autores, descritos na Tabela 4.11.

Tabela 4.12 - Parâmetros da cinética química simulados para a oxidação do material volátil VM, CO e H<sub>2</sub>, modificado de Kangwanpongpan (2013).

| Reação         | Mecanismo   | Referências                     | Reação | A <sub>g</sub>         | E <sub>g</sub><br>[J/mol] | TE  | Ordem de Reação  |
|----------------|-------------|---------------------------------|--------|------------------------|---------------------------|-----|--|
| VM             | 2, 3 passos | Shaw <i>et al.</i><br>(1991)    | d, irr | 1,623x10 <sup>6</sup>  | 5,066x10 <sup>4</sup>     | 0   | VM(1), O <sub>2</sub> (1)                              |
| VM             | 3 passos    | Rückert <i>et al.</i><br>(2003) | d, irr | 7,280x10 <sup>9</sup>  | 5,066x10 <sup>5</sup>     | 0,5 | VM(1), O <sub>2</sub> (1)                              |
| VM             | 3 passos    | Zimont <i>et al.</i><br>(1969)  | d, irr | 2,330x10 <sup>11</sup> | 1,675x10 <sup>5</sup>     | 0,5 | VM(1), O <sub>2</sub> (1)                              |
| CO             | 3 passos    | Howard <i>et al.</i><br>(1973)  | d, irr | 1,300x10 <sup>11</sup> | 1,671 x10 <sup>5</sup>    | 0   | CO(1), O <sub>2</sub> (0,5),<br>H <sub>2</sub> O(0,5)  |
| CO             | 3 passos    | Rückert <i>et al.</i><br>(2003) | d, irr | 5,420x10 <sup>9</sup>  | 1,256 x10 <sup>5</sup>    | 0   | CO(1), O <sub>2</sub> (0,25),<br>H <sub>2</sub> O(0,5) |
| H <sub>2</sub> | 3 passos    | Rückert <i>et al.</i><br>(2003) | d, irr | 1,000x10 <sup>8</sup>  | 8,374x10 <sup>3</sup>     | 0   | H <sub>2</sub> (1), O <sub>2</sub> (1)                 |

O termo *irr* é a reação irreversível e *d* a reação direta. A<sub>g</sub> representa o fator pré-exponencial e A<sub>g</sub> pode possuir as várias unidades [m], [s], [K] e mol que dependeram do termo exponencial do produto na ordem de reação. Na equação de Arrhenius, TE, é o expoente da temperatura do gás.

Utilizou-se o modelo de radiação *discrete transfer* e as demais opções mostradas na, Tabela 4.13. Analisou-se estes modelos de radiação para os casos de 1 a 6 da Tabela 4.11.

Tabela 4.13 – Opções utilizadas para o modelo radioativo.

| Modelo Radioativo       |                            |
|-------------------------|----------------------------|
| Opção                   | <i>Discrete Transfer</i>   |
| Modo de transferência   | <i>Participating Media</i> |
| <i>Spectral Model</i>   | <i>Gray</i>                |
| <i>Scattering Model</i> | Isotrópico                 |

Diante do exposto, a simulação numérica em ANSYS CFX foi realizada com os modelos descritos na Tabela 3.3, além das cinéticas químicas apresentadas nas Tabelas 4.11 e 4.12, e os modelos de radiação da Tabela 4.13, considerando que para as partículas o modelo

empregado foi Monte Carlo, MC, uma vez que o ANSYS CFX só libera este modelo para simular a partícula do carvão.

A seguir são mostrados os resultados da simulação comparados com os valores experimentais da oxi-combustão do carvão Rhenish.

## 4.6. Simulação

Considerando as condições operacionais do experimento de oxi-combustão do carvão linhito pulverizado, já mencionadas, a validação da simulação numérica é apresentada da seguinte forma: campos do vetor velocidade axial e de temperatura, e gráficos do perfil de velocidade axial, de temperatura e de fração volumétrica de  $O_2$ . Os gráficos de velocidade axial foram feitos para as distâncias axiais a partir do queimador, 0,025 [m], 0,05 [m], 0,2 [m] e 0,3 [m], conforme Figura 4.6, enquanto que para a temperatura e a fração volumétrica de  $O_2$  foram para as distâncias axiais 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] a partir da saída do queimador.

Os modelos de turbulência utilizados na simulação foram os modelos k- $\epsilon$  e SST, de modo a se obter comparação entre os modelos selecionados. As Tabelas 4.11 e 4.12 apresentam os parâmetros da cinética química para matérias voláteis, CO e  $H_2$ , que foram utilizados na combustão, com os modelos de turbulência k- $\epsilon$  e SST. Após realizar várias simulações com cada um dos casos; o caso 6 apresentou a simulação com valores mais próximos do experimento utilizando os dois modelos de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST. Por essa razão, levantou-se apenas duas curvas de resultado, um para cada modelo de turbulência empregado na simulação da oxi-combustão.

Os demais modelos empregados na simulação da oxi-combustão, modelos de desvolatilização, de oxidação do *char*, de combustão e de radiação, estão descritos na Tabela 3.3, como já mencionados no item 4.5.

#### 4.6.1. Raio do forno na distância axial 0,025 [m] do queimador

A Figura 4.7 mostra a velocidade axial em função do raio, na distância axial 0,025 [m] do queimador. Do centro ao raio 0,03 [m], nota-se que as diferenças mínimas com relação ao experimento são 0,29 [m/s] e 0,67 [m/s], nos raios 0,01 [m] e 0,025 [m], e as diferenças máximas são 1,58 [m/s] e 3,01 [m/s], nos raios 0,020 [m] e 0,0 [m], para os modelos k-ε padrão e SST, respectivamente. Do raio 0,03 [m] até a parede, as diferenças de máximas velocidades surgem próximas ao raio de saída do queimador, sendo valores máximos de 2,55 [m/s] e 1,83 [m/s], nos raios 0,050 [m] e 0,0040 [m], modelo k-ε padrão e SST, respectivamente.

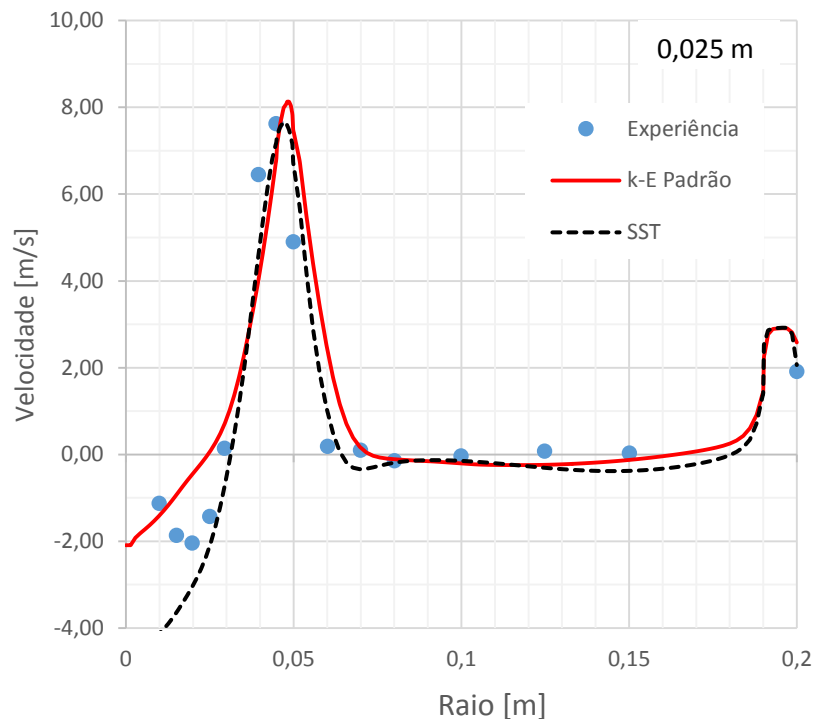


Figura 4.7 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,025 [m].

Observa-se as medidas da velocidade axial e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k-ε padrão e SST, na distância axial 0,025 [m] do queimador, Tabela 4.14. Além disso, possui a diferença de velocidade axial entre simulações e experimento.

Tabela 4.14 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,025 [m] do queimador.

|      | Experimento      | k-ε padrão       |           | SST              |           |
|------|------------------|------------------|-----------|------------------|-----------|
| Raio | Velocidade Axial | Velocidade Axial | Diferença | Velocidade Axial | Diferença |
| [m]  | [m/s]            | [m/s]            | -         | [m/s]            | -         |
| 0,01 | -1,12            | -1,41            | 0,29      | -4,13            | 3,01      |
| 0,02 | -1,86            | -0,92            | 0,94      | -3,63            | 1,77      |
| 0,02 | -2,04            | -0,45            | 1,58      | -3,04            | 1,00      |
| 0,02 | -1,43            | 0,07             | 1,49      | -2,09            | 0,67      |
| 0,03 | 0,15             | 0,71             | 0,56      | -0,72            | 0,87      |
| 0,04 | 6,45             | 4,04             | 2,41      | 4,62             | 1,83      |
| 0,04 | 7,63             | 6,77             | 0,86      | 7,17             | 0,46      |
| 0,05 | 4,90             | 7,45             | 2,55      | 6,69             | 1,79      |
| 0,06 | 0,19             | 2,41             | 2,22      | 1,00             | 0,81      |
| 0,07 | 0,10             | 0,16             | 0,06      | -0,34            | 0,44      |
| 0,08 | -0,14            | -0,11            | 0,03      | -0,19            | 0,05      |
| 0,10 | -0,03            | -0,20            | 0,18      | -0,15            | 0,12      |
| 0,12 | 0,08             | -0,24            | 0,32      | -0,31            | 0,39      |
| 0,15 | 0,04             | -0,12            | 0,16      | -0,38            | 0,41      |
| 0,20 | 1,91             | 2,58             | 0,67      | 2,06             | 0,15      |

Como já mencionado, a validação desta distância axial não foi realizada para a temperatura e a fração volumétrica de O<sub>2</sub>, devido ao fato de não haver medições dos respectivos parâmetros.

#### 4.6.2. Raio do forno na distância axial 0,05 [m] do queimador

A Figura 4.8 apresenta a velocidade axial em função do raio, na distância axial 0,05 [m] do queimador. Nas duas simulações mostradas na Figura 4.8, nota-se que no intervalo de raio entre 0,0 [m] e 0,04 [m], os modelos k-ε padrão e SST possuem valores de -2,27 a -1,52 [m/s] e -3,74 a 1,78 [m/s], respectivamente, e o experimento de -1,64 a 2,98 [m/s]. No raio de 0,05 [m] os valores da velocidade axial das simulações são, 5,94 [m/s] e 6,23 [m/s], enquanto o valor do experimento é de 5,09 [m/s]. As diferenças máximas de velocidade axial, entre 0,06 e 0,1 [m] são de 0,53 [m/s] e 0,27 [m/s], para modelo k-ε padrão e SST, respectivamente. Na parede nota-se que os valores da velocidade axial são de 2,52 [m/s] e 1,59 [m/s], respectivamente,

comparado ao experimento,  $0,45 \text{ [m/s]}$ . A diferença mínima e máxima da velocidade axial da simulação e do experimento, no modelo k- $\epsilon$  padrão, são  $0,02 \text{ [m/s]}$  e  $2,07 \text{ [m/s]}$ , para os raios  $0,04 \text{ [m]}$  e  $0,2 \text{ [m]}$ , respectivamente. O modelo SST apresenta diferença entre o valor da velocidade axial e do experimento, mínimo e máximo, de  $0,11 \text{ [m/s]}$  e  $3,05 \text{ [m/s]}$ , nos raios  $0,1 \text{ [m]}$  e  $0,01 \text{ [m]}$ , respectivamente.

Pode-se dizer que na maior parte do raio a menor diferença com relação ao experimento encontra-se para o modelo k- $\epsilon$  padrão. O valor da medida experimental próximo à parede aproxima-se mais do modelo SST.

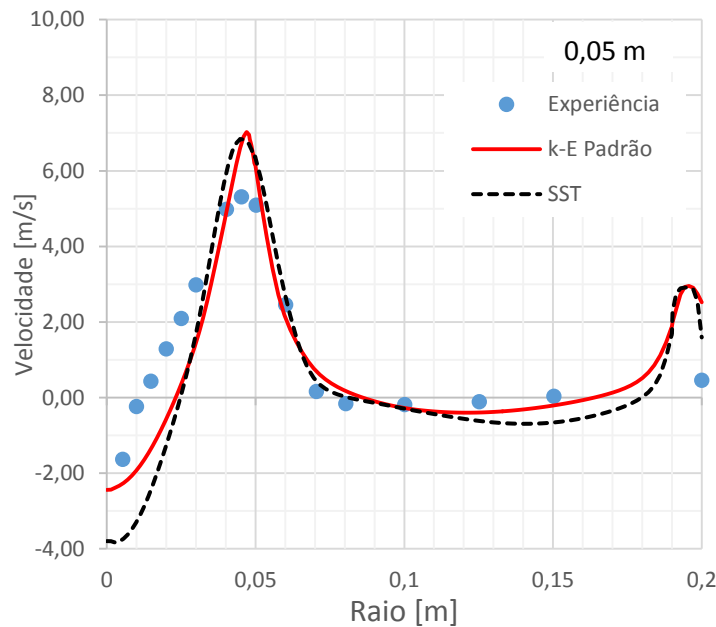


Figura 4.8 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial  $0,05 \text{ [m]}$ .

Observa-se as medidas da velocidade axial e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial  $0,05 \text{ [m]}$  do queimador, Tabela 4.15. Além disso, possui a diferença de velocidade axial entre simulações e experimento.



Tabela 4.15 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,05 [m] do queimador.

|      | Experimento      | k-ε padrão       |           | SST              |           |
|------|------------------|------------------|-----------|------------------|-----------|
| Raio | Velocidade Axial | Velocidade Axial | Diferença | Velocidade Axial | Diferença |
| [m]  | [m/s]            | [m/s]            | -         | [m/s]            | -         |
| 0,01 | -1,64            | -2,27            | 0,63      | -3,74            | 2,11      |
| 0,01 | -0,24            | -1,92            | 1,68      | -3,28            | 3,05      |
| 0,01 | 0,44             | -1,32            | 1,75      | -2,38            | 2,82      |
| 0,02 | 1,29             | -0,52            | 1,81      | -1,20            | 2,49      |
| 0,03 | 2,09             | 0,42             | 1,67      | 0,17             | 1,92      |
| 0,03 | 2,98             | 1,52             | 1,46      | 1,79             | 1,19      |
| 0,04 | 4,98             | 5,00             | 0,02      | 6,03             | 1,05      |
| 0,05 | 5,31             | 6,79             | 1,48      | 6,83             | 1,52      |
| 0,05 | 5,09             | 5,94             | 0,85      | 6,23             | 1,14      |
| 0,06 | 2,45             | 2,06             | 0,40      | 2,59             | 0,13      |
| 0,07 | 0,16             | 0,69             | 0,53      | 0,43             | 0,27      |
| 0,08 | -0,16            | 0,17             | 0,33      | 0,02             | 0,18      |
| 0,10 | -0,18            | -0,28            | 0,10      | -0,30            | 0,11      |
| 0,13 | -0,11            | -0,39            | 0,28      | -0,62            | 0,51      |
| 0,15 | 0,04             | -0,20            | 0,24      | -0,66            | 0,69      |
| 0,20 | 0,45             | 2,52             | 2,07      | 1,59             | 1,14      |

A Figura 4.9 mostra o perfil de temperatura ao longo do raio, na distância axial 0,05 [m] do queimador. Na região de 0,0 até 0,03 [m], os valores de temperatura da simulação são inferiores à do experimento para ambos os modelos, sendo que os valores de temperatura do modelo SST estão mais próximos do experimento. Os valores do experimento é de 1263 [K], 1265 [K] e 1308 [K] nos raios analisados, com desvios em relação ao experimento de 8,72%, 9,12% e 12,9% para o modelo k-ε padrão, e desvios de 7,61%, 7,72% e 9,74% para o modelo SST. Entre 0,04 e 0,05 [m], os resultados de temperatura do modelo SST aproxima-se mais do que o modelo k-ε padrão, desvios de 1,06% e 7,76% para o primeiro modelo. Entretanto, na região de 0,05 a 0,2 [m] os dois modelos de turbulência, apresentaram valores de temperatura bem mais próximos dos valores experimentais, com os maiores desvios de 11,81% e 11,39%, nos raios 0,040 [m] e 0,075 [m], respectivamente.

Para o modelo k-ε padrão, o desvio mínimo com relação ao experimento localiza-se nos raios 0,030 [m] é de 0,88% e o desvio máximo é de 12,90% no raio de 0,020 [m]. O modelo SST, o máximo desvio é de 11,39% para o raio de 0,075 [m] e o desvio mínimo é de 1,06% para o raio de 0,040 [m].

Nota-se na Figura 4.9 que os resultados da temperatura prevista pelos dois modelos apresentam um valor mínimo de temperatura localizado no raio de saída do *quarl*. O valor mínimo da temperatura do modelo SST é menor do que o modelo k- $\epsilon$  padrão, sendo de 990 [K] em 0,045 [m] e o k- $\epsilon$  padrão de 820 [K], em 0,052 [m]. Este fato se deve a interação entre os modelos de turbulência, combustão e radiação que não representam de forma correta o fenômeno nesta região. Entretanto, o modelo SST tem uma interação diferente com estes modelos e juntos representam melhor o fenômeno físico nesta região, como pode ser visto na Figura 4.9. As representações dos modelos k- $\epsilon$  padrão e SST estão da Figura 4.9 estão de acordo com os valores obtidos de outras simulações em CFD, como os autores Kangwanpongpan (2013), Warzecha e Boguslawski (2014), entre outros.

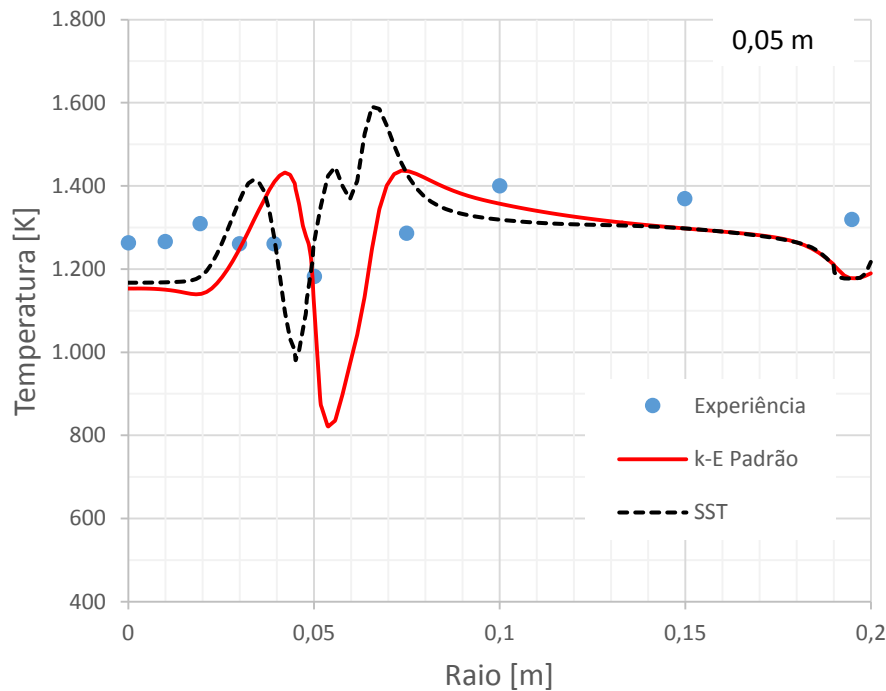


Figura 4.9 – Temperatura ao longo do raio do forno na distância axial 0,05 [m].

Nota-se as medidas da temperatura e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial 0,05 [m] do queimador, Tabela 4.16. Além disso, possui o desvio de temperatura da simulação com relação ao experimento.

Tabela 4.16 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,05 [m] do queimador.

|      | Experimento | k-ε padrão  |        | SST         |        |
|------|-------------|-------------|--------|-------------|--------|
| Raio | Temperatura | Temperatura | Desvio | Temperatura | Desvio |
| [m]  | [K]         | [K]         | [%]    | [K]         | [%]    |
| 0,00 | 1263        | 1062        | 15,94  | 1152        | 8,77   |
| 0,01 | 1266        | 1033        | 18,38  | 1143        | 9,67   |
| 0,02 | 1309        | 954         | 27,14  | 1106        | 15,49  |
| 0,03 | 1261        | 986         | 21,75  | 1250        | 0,81   |
| 0,04 | 1261        | 1182        | 6,21   | 1352        | -7,24  |
| 0,05 | 1182        | 1152        | 2,55   | 1126        | 4,75   |
| 0,07 | 1286        | 1384        | -7,59  | 1329        | -3,31  |
| 0,10 | 1400        | 1334        | 4,70   | 1280        | 8,54   |
| 0,15 | 1370        | 1294        | 5,54   | 1278        | 6,66   |
| 0,19 | 1319        | 1175        | 10,90  | 1175        | 10,92  |

A Figura 4.10 apresenta a fração volumétrica de O<sub>2</sub> ao longo do raio, na distância axial 0,05 [m] do queimador. Na região de 0,0 até 0,02 [m], os resultados das simulações mostram que a fração volumétrica de O<sub>2</sub> é 0,0%, o que não ocorreu no experimento. A diferença da fração volumétrica de O<sub>2</sub> entre a simulação numérica dos dois modelos e o experimento é de 0,67 e 0,63% para os raios 0,0 e 0,02 [m], respectivamente. Nota-se na Figura 4.10, o raio 0,04 [m], o resultado do modelo SST se aproxima mais do valor experimental, com diferença de 1,96%, enquanto que o k-ε padrão 4,19%. No raio 0,05 [m], o resultado do modelo k-ε padrão aproxima-se mais do valor experimental, com diferença de 0,92% e o SST de 3,05%. Entre os raios 0,06 e 0,2 [m], os resultados das duas simulações, k-ε padrão e SST, mantiveram-se similar aos resultados experimentais, mantendo-se um perfil de fração volumétrica de O<sub>2</sub> semelhante ao do experimento. As diferenças entre os resultados da simulação e do experimento, mínima e máxima, são 1,67%, no raio 0,07 [m], e 4,72%, no raio 0,19 [m] (modelo k-ε padrão), respectivamente e 2,36%, no raio 0,1 [m], e 4,77% no raio 0,19 [m] (modelo SST), respectivamente.

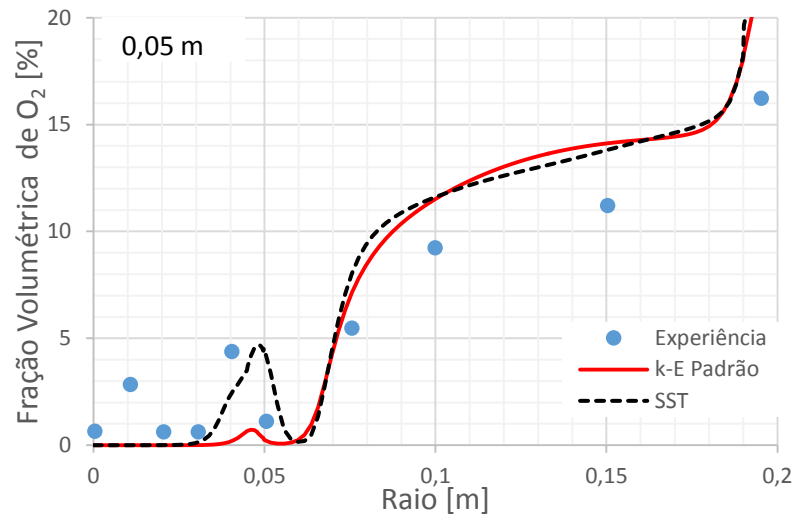


Figura 4.10 – Fração volumétrica de O<sub>2</sub> ao longo do raio do forno na distância axial 0,05 [m].

Observa-se as medidas da fração volumétrica de O<sub>2</sub> e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k-ε padrão e SST, na distância axial 0,05 [m] do queimador, Tabela 4.17. Além disso, possui a diferença da fração volumétrica de O<sub>2</sub> entre experimento e simulação.

Tabela 4.17 – Medidas das frações volumétricas de O<sub>2</sub> experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,05 [m] do queimador.

| Raio<br>[m] | Experimento                                       | k-ε padrão  |           | SST   |           |
|-------------|---|---|-----------|---|-----------|
|             | Fração<br>Volumétrica<br>de O <sub>2</sub><br>[%] | Fração<br>Volumétrica<br>de O <sub>2</sub><br>[%] | Diferença | Fração<br>Volumétrica<br>de O <sub>2</sub><br>[%] | Diferença |
| 0,00        | 0,67  | 0,00  | 0,67      | 0,00  | 0,67      |
| 0,01        | 2,85  | 0,00  | 2,85      | 0,00  | 2,84      |
| 0,02        | 0,63  | 0,00  | 0,63      | 0,00  | 0,62      |
| 0,03        | 0,63  | 0,01  | 0,62      | 0,14  | 0,49      |
| 0,04        | 4,39  | 0,20  | 4,19      | 2,45  | 1,94      |
| 0,05        | 1,13  | 0,21  | 0,92      | 4,18  | 3,05      |
| 0,08        | 5,48  | 7,11  | 1,63      | 8,00  | 2,52      |
| 0,10        | 9,25  | 11,51   | 2,26      | 11,60   | 2,36      |
| 0,15        | 11,21   | 14,12   | 2,90      | 13,80   | 2,59      |
| 0,20        | 16,23   | 20,96   | 4,72      | 21,01   | 4,77      |

### 4.6.3. Raio do forno na distância axial 0,2 [m] do queimador

A Figura 4.11 mostra a velocidade axial em função do raio na distância axial 0,2 [m] do queimador. Nota-se na Figura 4.11, entre os raios 0,0 e 0,4 [m], que os modelos k-ε padrão e SST apresentam resultados da velocidade axial próximos ao do experimento, sendo a simulação SST a que possui as menores diferenças. Entre 0,05 e 0,1 [m], os resultados de ambas simulações têm maiores diferenças de velocidade axial, sendo que os valores, mínimos e máximos, das diferenças entre os resultados da simulação e do experimento são 0,60 [m/s], no raio 0,1 [m] e 2,61 [m/s], no raio 0,07 [m] (modelo k-ε padrão), respectivamente e 0,72 [m/s], no raio 0,1 [m] e 2,47 [m/s], no raio 0,06 [m] (modelo SST), respectivamente. A Figura 4.11, mostra que no intervalo de raio 0,1 a 0,15 [m], os resultados da velocidade axial da simulação do modelo k-ε padrão são os que mais se aproximaram dos resultados experimentais. Já para o raio 0,2 [m], o resultado da velocidade axial do modelo SST tem um valor menor de diferença de velocidade, 0,72 [m/s].

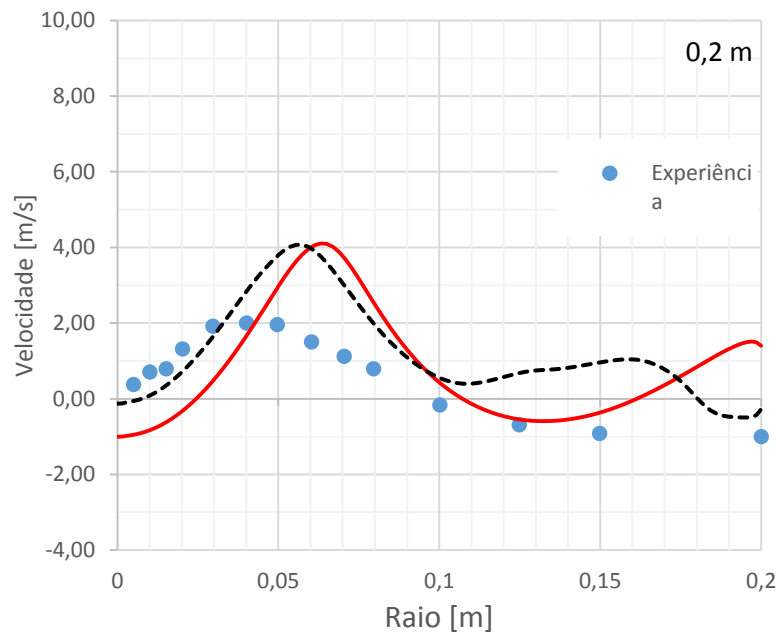


Figura 4.11 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,2 [m].

Observa-se as medidas da velocidade axial e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k-ε padrão e SST, na distância axial 0,2 [m] do queimador, Tabela 4.18. Além disso, possui a diferença de velocidade axial entre experimento e simulação.

Tabela 4.18 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,2 [m] do queimador.

|      | Experimento      | k-ε padrão       |           | SST              |           |
|------|------------------|------------------|-----------|------------------|-----------|
| Raio | Velocidade Axial | Velocidade Axial | Diferença | Velocidade Axial | Diferença |
| [m]  | [m/s]            | [m/s]            | -         | [m/s]            | -         |
| 0,00 | 0,10             | -1,00            | 1,11      | -0,13            | 0,23      |
| 0,01 | 0,38             | -0,95            | 1,33      | -0,06            | 0,43      |
| 0,01 | 0,71             | -0,83            | 1,54      | 0,09             | 0,62      |
| 0,02 | 0,79             | -0,62            | 1,41      | 0,36             | 0,44      |
| 0,02 | 1,31             | -0,32            | 1,63      | 0,72             | 0,59      |
| 0,03 | 1,92             | 0,48             | 1,44      | 1,65             | 0,27      |
| 0,04 | 2,00             | 1,67             | 0,33      | 2,84             | 0,84      |
| 0,05 | 1,96             | 2,92             | 0,96      | 3,76             | 1,80      |
| 0,06 | 1,50             | 4,00             | 2,50      | 3,97             | 2,47      |
| 0,07 | 1,13             | 3,73             | 2,61      | 3,01             | 1,89      |
| 0,08 | 0,79             | 2,55             | 1,76      | 2,00             | 1,20      |
| 0,10 | -0,17            | 0,43             | 0,60      | 0,55             | 0,72      |
| 0,12 | -0,69            | -0,55            | 0,14      | 0,68             | 1,37      |
| 0,15 | -0,92            | -0,36            | 0,55      | 0,96             | 1,88      |
| 0,20 | -1,00            | 1,40             | 2,40      | -0,28            | 0,72      |

A Figura 4.12 mostra o perfil de temperatura ao longo do raio na distância axial 0,2 [m] do queimador. Nota-se que na Figura 4.12, entre os raios 0,0 [m] e 0,5 [m], as simulações dos modelos apresentam resultados de temperaturas inferiores aos resultados do experimento, com desvios em torno de 10%. No raio 0,05 [m], o valor de temperatura para o modelo SST se aproxima do valor do experimento, 1445 [K], enquanto do experimento é 1509 [K]. No intervalo de raios 0,07 a 0,1 [m], os resultados de temperatura para o modelo k-ε padrão, têm desvios mínimos e máximos de 0,03% e 3,02%, nos raios 0,07 e 0,1 [m], respectivamente. Nota-se na Figura 4.12, o raio com desvio máximo para ambos os modelos é 0,15 [m], com valores de 14,71% e 16,56%, para k-ε padrão e SST, respectivamente, para a temperatura do experimento de 1498 [K]. Na parede, o resultado da temperatura do modelo SST tem uma diferença menor comparado ao k-ε padrão, 6,30% e 11,18%, respectivamente, com o valor experimental de 1293 [K].

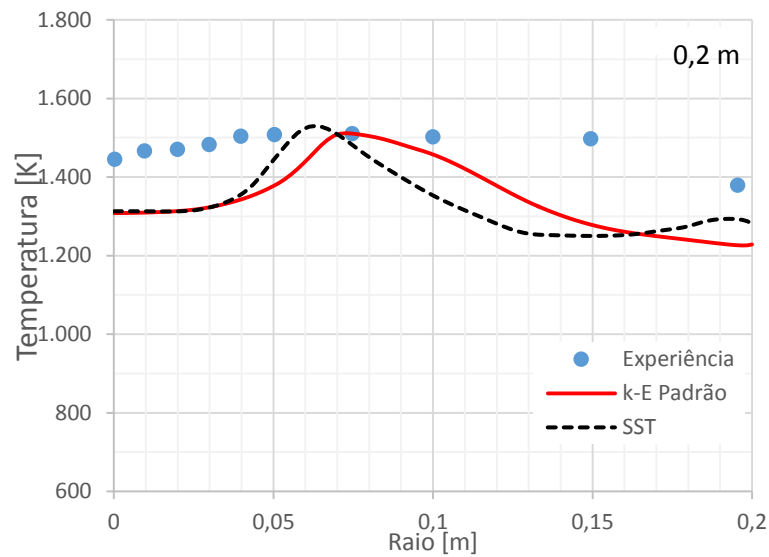


Figura 4.12 – Temperatura axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,2 [m].

Nota-se as medidas da temperatura e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial 0,2 [m] do queimador, Tabela 4.19. Além disso, possui o desvio de temperatura da simulação com relação ao experimento.

Tabela 4.19 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k- $\epsilon$  padrão e SST na distância axial 0,2 [m] do queimador.

|          | Experimento     | k- $\epsilon$ padrão |            | SST             |            |
|----------|-----------------|----------------------|------------|-----------------|------------|
| Raio [m] | Temperatura [K] | Temperatura [K]      | Desvio [%] | Temperatura [K] | Desvio [%] |
| 0,00     | 1446            | 1308                 | 9,50       | 1313            | 9,18       |
| 0,01     | 1467            | 1310                 | 10,70      | 1313            | 10,48      |
| 0,02     | 1471            | 1313                 | 10,73      | 1313            | 10,76      |
| 0,03     | 1484            | 1323                 | 10,80      | 1323            | 10,84      |
| 0,04     | 1505            | 1342                 | 10,83      | 1353            | 10,07      |
| 0,05     | 1509            | 1378                 | 8,65       | 1446            | 4,18       |
| 0,07     | 1511            | 1511                 | 0,03       | 1481            | 2,00       |
| 0,10     | 1503            | 1457                 | 3,02       | 1353            | 9,96       |
| 0,15     | 1498            | 1278                 | 14,71      | 1250            | 16,56      |
| 0,20     | 1380            | 1227                 | 11,11      | 1293            | 6,30       |

A Figura 4.13 mostra a fração volumétrica de  $O_2$  ao longo do raio na distância axial 0,2 [m] do queimador. Nota-se, entre os raios 0,0 [m] e 0,04 [m], que os resultados das simulações

da fração volumétrica de  $O_2$  é 0,0% e no experimento estes valores variam de 1,5 a 3,22%. A diferença mínima e máxima da fração volumétrica de  $O_2$  entre as simulações e o experimento tanto para o modelo k- $\epsilon$  padrão quanto para o SST é de 1,13 e 3,21%, para os raios 0,0 [m] e 0,04 [m], respectivamente. Entre os raios 0,05 e 0,2 [m], os resultados das simulações da fração volumétrica de  $O_2$  que tem o comportamento dos resultados experimentais é o modelo SST, diferença mínima e máxima de 1,06 e 7,51%, nos raios 0,05 [m] e 0,1 [m], respectivamente, e o resultado da fração volumétrica de  $O_2$  do modelo k- $\epsilon$  padrão, nesta região, tende a divergir do experimento a medida que o raio aumenta até a parede. Isto ocorre por causa da turbulência próxima a parede ser melhor representada pelo modelo SST, como pode ser visto na Figura 4.19, assim fornecendo um melhor resultado da fração volumétrica de  $O_2$ , manipuladas pelas reações químicas selecionadas no ANSYS CFX.

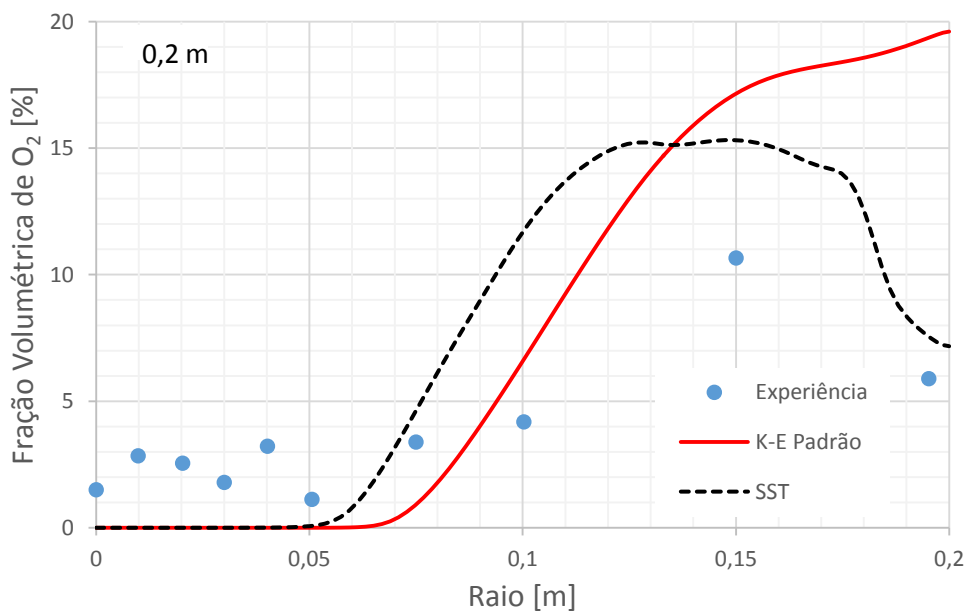


Figura 4.13 – Fração volumétrica de  $O_2$  ao longo do raio do forno na distância axial 0,2 [m].

Observa-se as medidas da fração volumétrica de  $O_2$  e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial 0,2 [m] do queimador, Tabela 4.20. Além disso, possui a diferença da fração volumétrica de  $O_2$  entre experimento e simulação.



Tabela 4.20 – Medidas das frações volumétricas de O<sub>2</sub> experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,2 [m] do queimador.

|      | Experimento                          | k-ε padrão                           |           | SST                                  |           |
|------|--------------------------------------|--------------------------------------|-----------|--------------------------------------|-----------|
| Raio | Fração Volumétrica de O <sub>2</sub> | Fração Volumétrica de O <sub>2</sub> | Diferença | Fração Volumétrica de O <sub>2</sub> | Diferença |
| [m]  | [%]                                  | [%]                                  | -         | [%]                                  | -         |
| 0,00 | 1,51                                 | 0,00                                 | 1,51      | 0,00                                 | 1,51      |
| 0,01 | 2,85                                 | 0,00                                 | 2,85      | 0,00                                 | 2,85      |
| 0,02 | 2,55                                 | 0,00                                 | 2,55      | 0,00                                 | 2,55      |
| 0,03 | 1,80                                 | 0,00                                 | 1,80      | 0,00                                 | 1,80      |
| 0,04 | 3,22                                 | 0,00                                 | 3,22      | 0,01                                 | 3,22      |
| 0,05 | 1,13                                 | 0,00                                 | 1,13      | 0,07                                 | 1,06      |
| 0,08 | 3,39                                 | 0,90                                 | 2,49      | 4,59                                 | 1,20      |
| 0,10 | 4,18                                 | 6,60                                 | 2,42      | 11,70                                | 7,51      |
| 0,15 | 10,67                                | 17,14                                | 6,48      | 15,31                                | 4,64      |
| 0,20 | 5,90                                 | 19,35                                | 13,45     | 7,58                                 | 1,68      |

#### 4.6.4. Raio do forno na distância axial 0,3 [m] do queimador

A Figura 4.14 mostra a velocidade axial ao longo do raio, na distância axial 0,3 [m] do queimador. Nota-se na Figura 4.14, que as regiões de 0,0 a 0,3 [m] e 0,15 a 0,2 [m], os resultados da velocidade axial nas duas simulações são próximos aos resultados do experimento, sendo que entre os dois modelos, o que melhor se aproximou, neste intervalo de raios, foi o k-ε padrão. As diferenças máximas, para o modelo k-ε padrão e SST, são de 0,4 [m/s] e 1,2 [m/s] no mesmo raio 0,04 [m], respectivamente. Entre 0,04 e 0,15 [m], têm as diferenças mínimas e máximas para os modelos, k-ε padrão e SST, e do experimento são 0,08 [m/s], no raio 0,15 [m], e 1,5 [m/s], no raio 0,07 [m], e 0,01 [m/s] no raio 0,15 [m] e 2,1 [m/s] no raio 0,07 [m], respectivamente. Apenas na parede do forno o modelo SST teve um melhor resultado da velocidade axial comparado ao resultado experimental, diferenças de 0,42 [m/s] e 0,22 [m/s], modelos k-ε padrão e SST, respectivamente.

Assim, os resultados do modelo k-ε padrão, ao longo de todo o raio, é o que mostra ter uma melhor característica aerodinâmica.

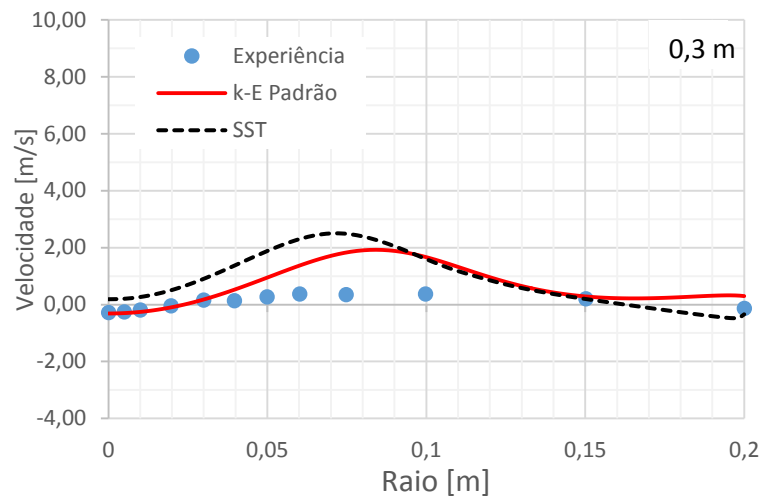


Figura 4.14 – Velocidade axial ao longo do raio do forno na distância axial 0,3 [m].

Observa-se as medidas da velocidade axial e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial 0,3 [m] do queimador, Tabela 4.21. Além disso, possui a diferença de velocidade axial entre experimento e simulação.

Tabela 4.21 – Medidas das velocidades axial experimental e das simulações numéricas k- $\epsilon$  padrão e SST na distância axial 0,3 [m] do queimador.

| Raio<br>[m] | Experimento                  | k- $\epsilon$ padrão         |           | SST                          |           |
|-------------|------------------------------|------------------------------|-----------|------------------------------|-----------|
|             | Velocidade<br>Axial<br>[m/s] | Velocidade<br>Axial<br>[m/s] | Diferença | Velocidade<br>Axial<br>[m/s] | Diferença |
| 0,00        | -0,27                        | -0,31                        | 0,04      | 0,19                         | 0,46      |
| 0,00        | -0,25                        | -0,30                        | 0,05      | 0,21                         | 0,46      |
| 0,01        | -0,19                        | -0,26                        | 0,07      | 0,27                         | 0,45      |
| 0,02        | -0,04                        | -0,10                        | 0,06      | 0,50                         | 0,54      |
| 0,03        | 0,17                         | 0,18                         | 0,01      | 0,90                         | 0,74      |
| 0,04        | 0,15                         | 0,52                         | 0,38      | 1,37                         | 1,22      |
| 0,05        | 0,27                         | 0,95                         | 0,68      | 1,88                         | 1,61      |
| 0,06        | 0,38                         | 1,37                         | 0,99      | 2,30                         | 1,92      |
| 0,07        | 0,35                         | 1,83                         | 1,47      | 2,49                         | 2,13      |
| 0,10        | 0,38                         | 1,67                         | 1,30      | 1,61                         | 1,23      |
| 0,15        | 0,21                         | 0,29                         | 0,08      | 0,20                         | 0,01      |
| 0,20        | -0,13                        | 0,30                         | 0,42      | -0,34                        | 0,22      |

A Figura 4.15 mostra o perfil da temperatura ao longo do raio, na distância axial 0,3 [m] do queimador. Nota-se que os resultados da temperatura para a simulação com o modelo k- $\epsilon$

padrão têm desvio com relação ao experimento de no máximo 6,1%, que localiza-se na parede do forno. O desvio mínimo do resultado da temperatura para o modelo k-ε padrão é de 0,23%, no raio 0,04 [m]. A Figura 4.15 mostra que o resultado da temperatura da simulação com o modelo SST têm valores de desvio de até 1,75%, entre os raios 0,0 [m] e 0,05 m. No intervalo de raios 0,07 [m] e 0,15 [m], o desvio mínimo e máximo são de 2,76%, no raio 0,1 [m], e 6,87%, no raio 0,07 [m], respectivamente. Portanto as duas simulações têm bons resultados de perfil de temperatura.

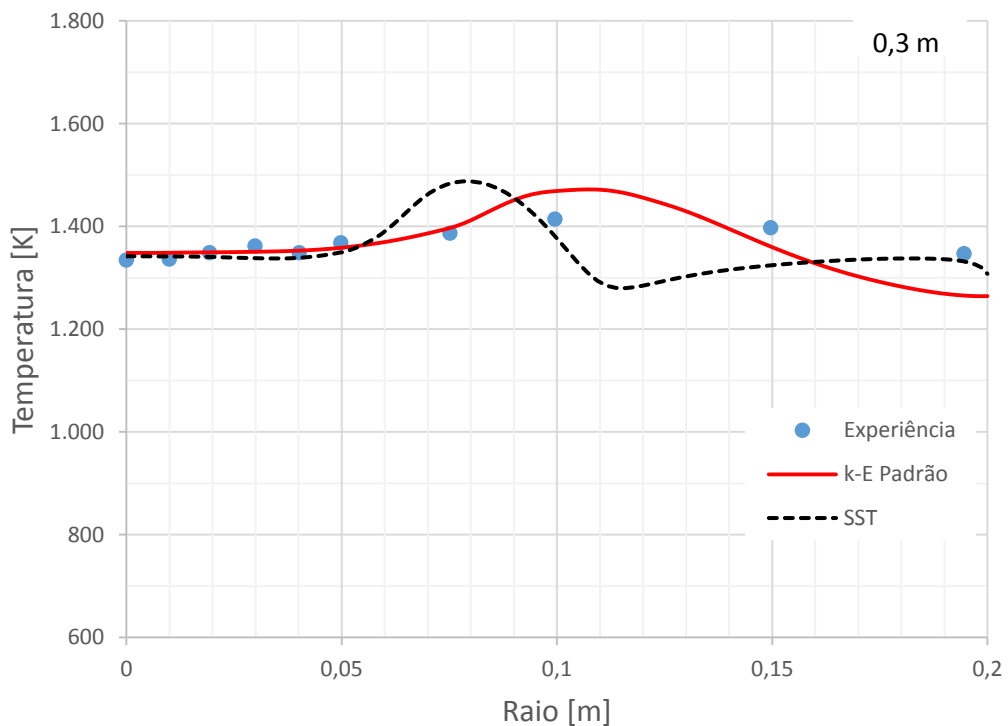


Figura 4.15 – Temperatura ao longo do raio do forno na distância axial 0,3 [m].

Nota-se as medidas da temperatura e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k-ε padrão e SST, na distância axial 0,3 [m] do queimador, Tabela 4.22. Além disso, possui o desvio de temperatura da simulação com relação ao experimento.

Tabela 4.22 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,3 [m] do queimador.

|      | Experimento | k-ε padrão  |        | SST         |        |
|------|-------------|-------------|--------|-------------|--------|
| Raio | Temperatura | Temperatura | Desvio | Temperatura | Desvio |
| [m]  | [K]         | [K]         | [%]    | [K]         | [%]    |
| 0,00 | 1335        | 1348        | -1,03  | 1342        | -0,54  |
| 0,01 | 1337        | 1349        | -0,90  | 1342        | -0,36  |
| 0,02 | 1349        | 1350        | -0,01  | 1341        | 0,65   |
| 0,03 | 1362        | 1351        | 0,84   | 1338        | 1,75   |
| 0,04 | 1349        | 1353        | -0,23  | 1339        | 0,81   |
| 0,05 | 1368        | 1359        | 0,70   | 1350        | 1,34   |
| 0,08 | 1387        | 1396        | -0,66  | 1483        | -6,87  |
| 0,10 | 1415        | 1469        | -3,84  | 1376        | 2,76   |
| 0,15 | 1398        | 1360        | 2,72   | 1325        | 5,25   |
| 0,19 | 1347        | 1265        | 6,08   | 1331        | 1,18   |

A Figura 4.16 mostra a fração volumétrica de  $O_2$  ao longo do raio, na distância axial 0,3 [m] do queimador. Nota-se, entre os raios 0,0 [m] e 0,05 [m], que os resultados das simulações da fração volumétrica de  $O_2$  é 0,0%, enquanto o experimento está entre 3,22% e 2,3%. A diferença mínima e máxima da fração volumétrica de  $O_2$  entre as simulações e o experimento tanto para o modelo k-ε padrão quanto para o SST é de 2,13 e 3,77%, para os raios 0,04 e 0,01 [m], respectivamente. Entre os raios 0,05 e 0,2 [m], os resultados das simulações da fração volumétrica de  $O_2$  que tem o comportamento dos resultados experimentais é o modelo SST, diferença mínima e máxima de 0,67 e 8,11%, nos raios 0,2 e 0,1 [m], respectivamente.

O resultado da fração volumétrica de  $O_2$ , no intervalo dos raios 0,15 a 0,2 [m], tende a divergir do experimento a medida que o raio aumenta até a parede. No intervalo dos raios 0,15 [m] e 0,2 [m] para o modelo SST possui um aumento e diminuição muito repentina. Isto ocorre por causa da turbulência que no modelo SST apresenta uma recirculação próximo a parede, como pode ser visto na Figura 4.19 (apresentado posteriormente). Assim fornecendo um melhor resultado da fração volumétrica de  $O_2$ , fornecidas pelas reações químicas selecionadas no ANSYS CFX.

Além disso pode-se observar que nesses raios citados existe poucos pontos de medição, de tal forma que não podem apontar com confiabilidade a situação real do problema.

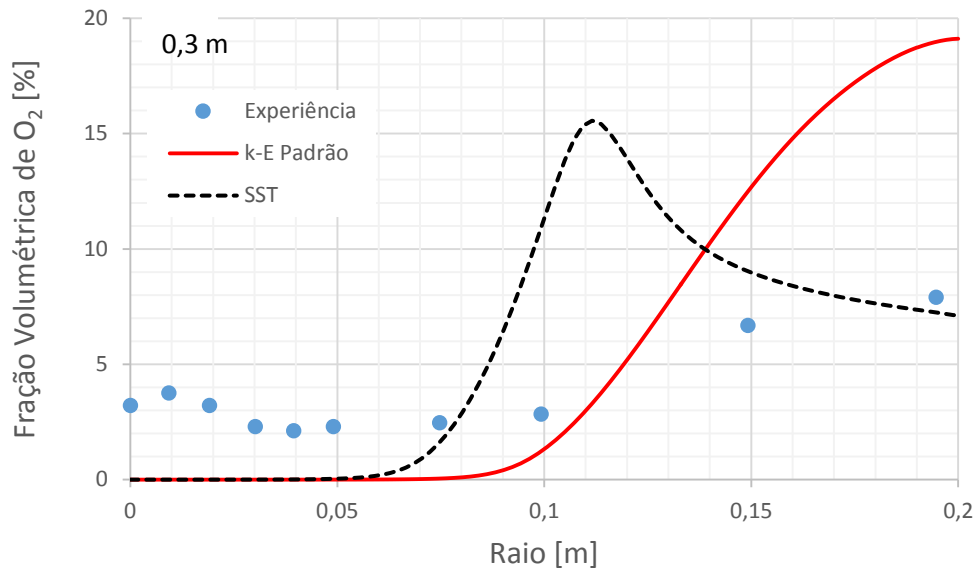


Figura 4.16 – Fração volumétrica de  $O_2$  ao longo do raio do forno na distância axial 0,3 [m].

Observa-se as medidas da fração volumétrica de  $O_2$  e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial 0,3 [m] do queimador, Tabela 4.23. Além disso, possui a diferença da fração volumétrica de  $O_2$  entre experimento e simulação.

Tabela 4.23 – Medidas das frações volumétricas de  $O_2$  experimental e das simulações numéricas k- $\epsilon$  padrão e SST na distância axial 0,3 [m] do queimador.

| Raio<br>[m] | Experimento                              | k- $\epsilon$ padrão                     |           | SST                                      |           |
|-------------|--|--|-----------|--|-----------|
|             | Fração<br>Volumétrica<br>de $O_2$<br>[%] | Fração<br>Volumétrica<br>de $O_2$<br>[%] | Diferença | Fração<br>Volumétrica<br>de $O_2$<br>[%] | Diferença |
| 0,00        | 3,22                                     | 0,00                                     | 3,22      | 0,00                                     | 3,22      |
| 0,01        | 3,77                                     | 0,00                                     | 3,77      | 0,00                                     | 3,77      |
| 0,02        | 3,22                                     | 0,00                                     | 3,22      | 0,00                                     | 3,22      |
| 0,03        | 2,30                                     | 0,00                                     | 2,30      | 0,00                                     | 2,30      |
| 0,04        | 2,13                                     | 0,00                                     | 2,13      | 0,01                                     | 2,12      |
| 0,05        | 2,30                                     | 0,00                                     | 2,30      | 0,04                                     | 2,26      |
| 0,07        | 2,47                                     | 0,05                                     | 2,42      | 1,61                                     | 0,86      |
| 0,10        | 2,85                                     | 1,24                                     | 1,61      | 10,95                                    | 8,11      |
| 0,15        | 6,69                                     | 12,43                                    | 5,74      | 9,05                                     | 2,36      |
| 0,19        | 7,91                                     | 18,99                                    | 11,08     | 7,24                                     | 0,67      |

#### 4.6.5. Raio do forno na distância axial 0,5 [m] do queimador

Para a distância axial 0,5 [m] do queimador o experimento não realizou medidas do perfil de velocidade axial, como já mencionado. Apenas realizou medidas de temperatura e de fração volumétrica de O<sub>2</sub>, para efeito de validação.

A Figura 4.17 mostra o perfil da temperatura ao longo do raio, na distância axial 0,5 [m] do queimador. Nota-se que os desvios mínimo e máximo do resultado da temperatura para o modelo k-ε padrão é de 0,10%, no raio 0,05 [m], e 2,37%, no raio 0,15 [m], respectivamente. O desvio mínimo e máximo, para o modelo SST, nessa região são de 0,96%, no raio 0,2 [m], e de 4,74%, no raio 0,02 [m], respectivamente. Os valores de SST no centro e na parede do forno são de 1387 [K] e 1354 [K], respectivamente. Nenhum dos dois modelos tiveram desvios maiores que 4,5%.

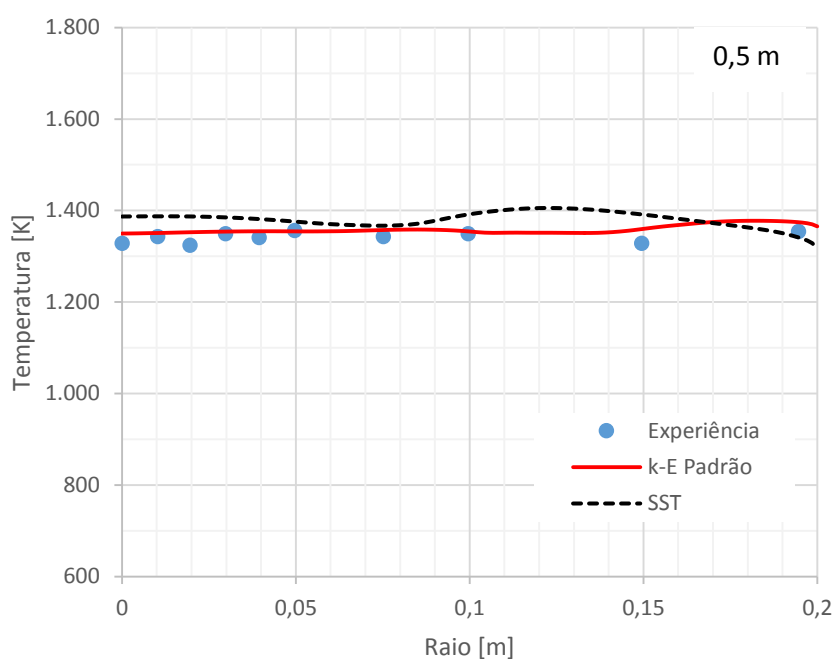


Figura 4.17 – Temperatura ao longo do raio do forno na distância axial 0,5 [m].

Nota-se as medidas da temperatura e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k-ε padrão e SST, na distância axial 0,5 [m] do queimador, Tabela 4.24. Além disso, possui o desvio de temperatura da simulação com relação ao experimento.

Tabela 4.24 – Medidas das temperaturas experimental e das simulações numéricas k-ε padrão e SST na distância axial 0,5 [m] do queimador.

|      | Experimento | k-ε padrão  |        | SST         |        |
|------|-------------|-------------|--------|-------------|--------|
| Raio | Temperatura | Temperatura | Desvio | Temperatura | Desvio |
| [m]  | [K]         | [K]         | [%]    | [K]         | [%]    |
| 0,00 | 1328        | 1350        | -1,60  | 1387        | -4,40  |
| 0,01 | 1343        | 1351        | -0,57  | 1387        | -3,29  |
| 0,02 | 1324        | 1352        | -2,13  | 1387        | -4,74  |
| 0,03 | 1349        | 1354        | -0,33  | 1385        | -2,62  |
| 0,04 | 1341        | 1355        | -1,01  | 1381        | -3,01  |
| 0,05 | 1356        | 1354        | 0,10   | 1376        | -1,45  |
| 0,08 | 1343        | 1357        | -1,05  | 1367        | -1,76  |
| 0,10 | 1349        | 1354        | -0,34  | 1392        | -3,15  |
| 0,15 | 1328        | 1360        | -2,37  | 1391        | -4,72  |
| 0,19 | 1354        | 1374        | -1,52  | 1341        | 0,96   |

A Figura 4.18 mostra a fração volumétrica de O<sub>2</sub> ao longo do raio na distância axial 0,5 [m] do queimador. Nota-se, entre os raios 0,0 [m] e 0,03 [m], que os resultados da simulação da fração volumétrica de O<sub>2</sub> é próximo de 0,0% para o modelo k-ε padrão, e entre 0,5 e 0,54% para o modelo SST. A diferença mínima e máxima da fração volumétrica de O<sub>2</sub> entre as simulações e o experimento para o modelo k-ε padrão é de 2,40 e 3,35%, para os raios 0,03 e 0,01 [m], respectivamente.

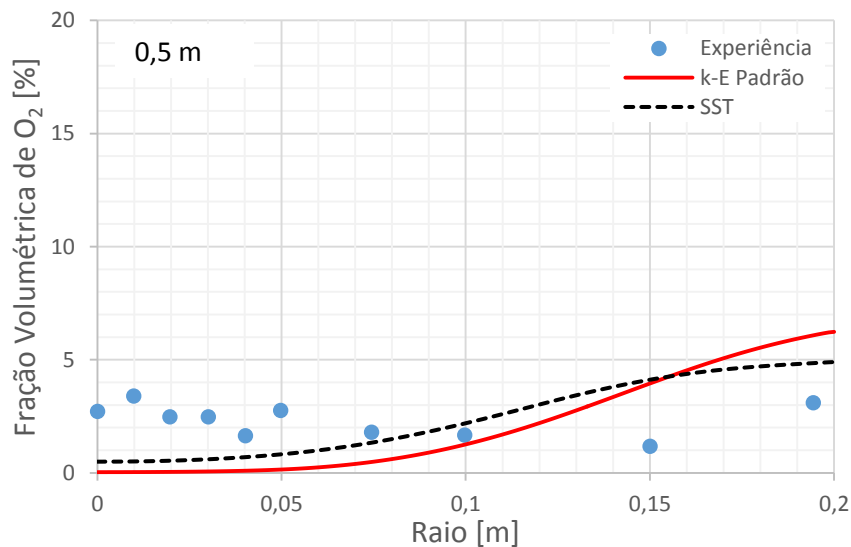


Figura 4.18 – Fração volumétrica de O<sub>2</sub> ao longo do raio do forno na distância axial 0,5 [m].

A diferença mínima e máxima da fração volumétrica de  $O_2$  para o modelo SST é de 1,52% e 2,55%, para os raios 0,03 [m] e 0,01 [m] respectivamente. Entre os raios 0,05 e 0,2 [m], os resultados das simulações da fração volumétrica de  $O_2$  estão mais próximos dos resultados experimentais para o modelo SST, diferença mínima e máxima de 0,29% e 1,63%, nos raios 0,07 [m] e 0,15 [m], respectivamente.

Observa-se as medidas da fração volumétrica de  $O_2$  e os respectivos valores obtidos pelas simulações numéricas que utilizam o modelo de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST, na distância axial 0,5 [m] do queimador, Tabela 4.25. Além disso, possui a diferença da fração volumétrica de  $O_2$  entre experimento e simulação.

Tabela 4.25 – Medidas das frações volumétricas de  $O_2$  experimental e das simulações numéricas k- $\epsilon$  padrão e SST na distância axial 0,5 [m] do queimador.

| Raio<br>[m] | Experimento                        | k- $\epsilon$ padrão               |                | SST                                |                |
|-------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------|------------------------------------|----------------|
|             | Fração Volumétrica de $O_2$<br>[%] | Fração Volumétrica de $O_2$<br>[%] | Diferença<br>- | Fração Volumétrica de $O_2$<br>[%] | Diferença<br>- |
| 0,00        | 2,72                               | 0,03                               | 2,69           | 0,50                               | 2,22           |
| 0,01        | 3,39                               | 0,04                               | 3,35           | 0,51                               | 2,88           |
| 0,02        | 2,47                               | 0,05                               | 2,42           | 0,54                               | 1,93           |
| 0,03        | 2,47                               | 0,06                               | 2,40           | 0,60                               | 1,86           |
| 0,04        | 1,63                               | 0,10                               | 1,53           | 0,70                               | 0,93           |
| 0,05        | 2,76                               | 0,15                               | 2,61           | 0,82                               | 1,94           |
| 0,07        | 1,80                               | 0,48                               | 1,32           | 1,34                               | 0,46           |
| 0,10        | 1,67                               | 1,25                               | 0,42           | 2,18                               | 0,51           |
| 0,15        | 1,17                               | 3,95                               | 2,78           | 4,12                               | 2,95           |
| 0,19        | 3,10                               | 6,07                               | 2,97           | 4,85                               | 1,75           |

O escoamento dentro do combustor possui *swirl* especialmente na região de saída do queimador, próximo do *quarl* e as diferenças entre os campos de velocidades produzidos pelos modelos k- $\epsilon$  padrão e SST são devido ao método de solução que cada modelo utiliza no escoamento turbulento.

A comparação do resultado da simulação numérica da velocidade axial com o experimento, Figuras 4.7 e 4.8 mostraram uma boa aproximação com o experimento na saída do queimador. Nos raios de medida 0,2 [m] e 0,3 [m] algumas discrepâncias entre os resultados experimentais e das simulações para ambos os modelos, conforme pode ser visto nas Figuras



4.11 e 4.14. De maneira geral o modelo k- $\epsilon$  padrão associado com os modelos de combustão e radiação, previamente definidos, é o mais indicado para a previsão do perfil de velocidade axial.

O resultado do perfil de temperatura, da simulação numérica, para as quatro posições axiais, 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] do queimador, diferem do experimento para os dois modelos nas distâncias 0,05 [m] e 0,2 [m] do queimador, Figuras 4.9 e 4.12, respectivamente e se aproximam dos resultados experimentais nas distâncias 0,3 [m] e 0,5 [m] do queimador, Figuras 4.15 e 4.17, respectivamente. A razão pela qual isso acontece pode ser o modelo de turbulência, que não pode prever apropriadamente o comportamento da forte zona de recirculação na saída do queimador. De maneira geral o modelo de k- $\epsilon$  padrão associado com os modelos de combustão e radiação, previamente definidos, são os mais indicados para o perfil de temperatura.

O resultado da fração volumétrica de O<sub>2</sub>, da simulação numérica, para as quatro distâncias axiais do queimador, 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m], tem a mesma tendência do resultado do experimento para os dois modelos no raio 0,05 [m], Figura 4.10. Nas posições axiais 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] o modelo SST é o que mais se aproxima dos resultados experimentais, Figuras 4.13, 4.16 e 4.18, respectivamente. A razão pela qual isso acontece é que a fração volumétrica de O<sub>2</sub> no centro do combustor é baixa e próximo a parede do combustor os resultados da simulação numérica são superestimados em relação aos do experimento. O baixo conteúdo de oxigênio no centro do combustor é devido ao seu consumo durante o processo de combustão, o que corresponde ao perfil de temperatura, visto na Figura 4.9. De maneira geral o modelo SST associado com os modelos de combustão e radiação, previamente definidos, é o mais indicado para a previsão da fração volumétrica de O<sub>2</sub>.

#### 4.6.6. Campo de velocidade axial

A Figura 4.19 mostra o campo de velocidades axiais no plano longitudinal central para os modelos k- $\epsilon$  padrão e SST da simulação da oxi-combustão do carvão pulverizado. Nota-se na Figura 4.19a, o modelo k- $\epsilon$  padrão, as velocidades axiais na saída do queimador deslocam-se mais para o meio do raio do forno igualmente, o que ocorre com o modelo SST, Figura 4.19b, porém com uma velocidade maior, próxima a distância axial de 0,05 [m]. A recirculação do escoamento região B e D, Figura 4.19, aprofunda-se mais na distância longitudinal do forno

para o modelo k- $\epsilon$ . A recirculação no centro do forno se alonga mais em direção a saída para o modelo k- $\epsilon$ , região A, quando comparados com à simulação SST, região C. Além disso, no modelo SST existe recirculação próxima a parede que localiza-se na região de recirculação E que finaliza-se antes de encontrar a distância axial de 0,05 [m].

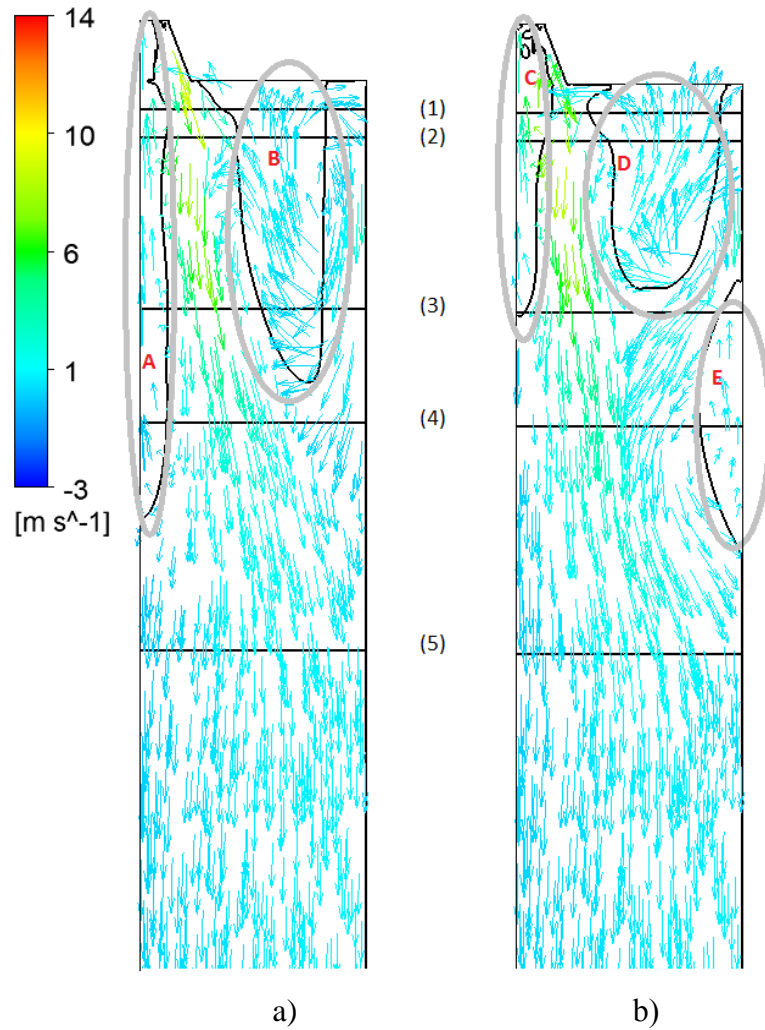


Figura 4.19 – Campo de velocidade axial no forno cilíndrico. a) k- $\epsilon$  padrão e b) SST.

#### 4.6.7. Campo de temperatura

A Figura 4.20 mostra os campos de temperatura para as simulações numéricas k- $\epsilon$  padrão e SST, interagindo com os modelos de combustão e radiação. Observa-se para os modelos k- $\epsilon$  padrão e SST, Figura 4.20a e b, que as maiores temperaturas estão destacadas na Figura 4.20. As regiões adjacentes as altas temperaturas, as correntes terciárias e *staging*,

mantém temperaturas menores. A corrente terciária, TS, na saída do *quarl*, para o modelo k- $\epsilon$  padrão, apresenta uma região mais extensa de menor temperatura do que o modelo SST. Nota-se na região de maior temperatura, que o modelo SST tem uma temperatura maior do que o modelo k- $\epsilon$  padrão, de 1650 [K].

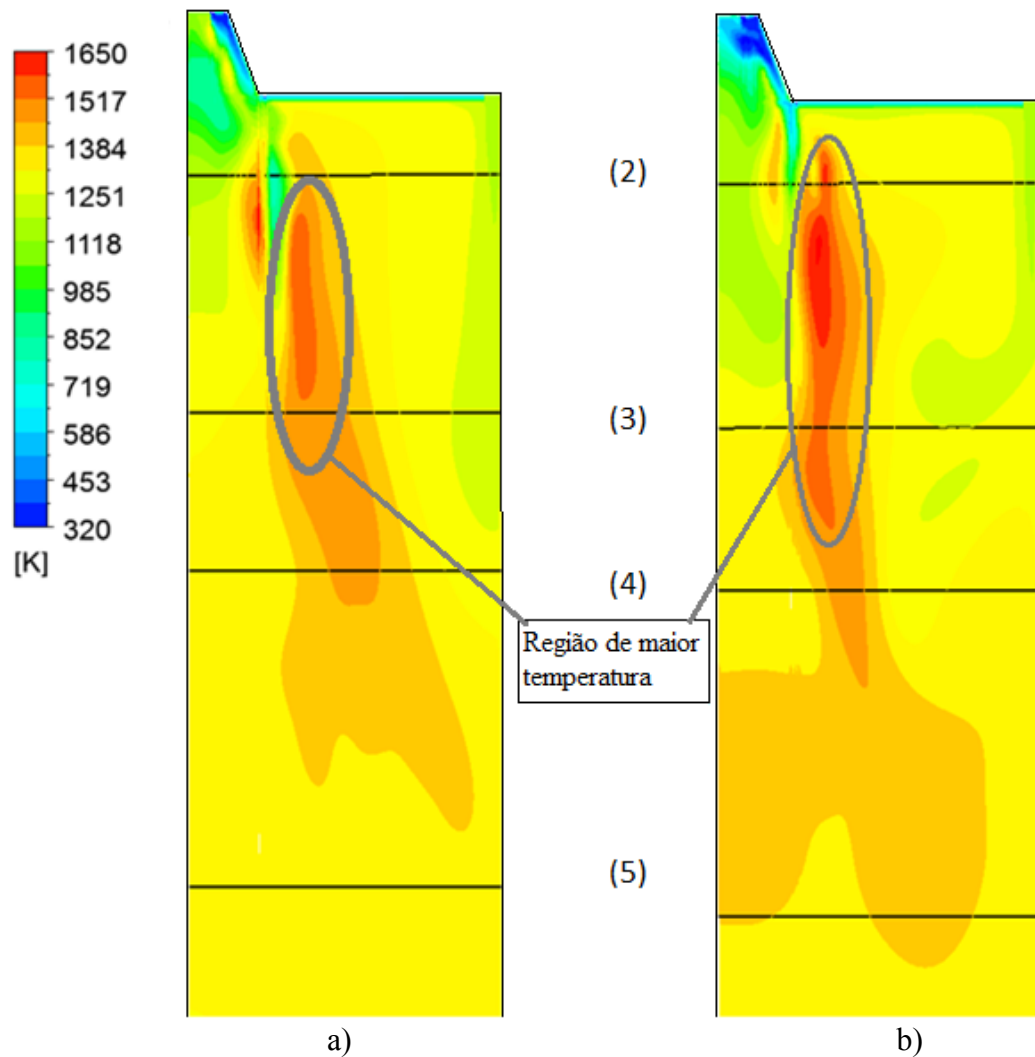


Figura 4.20 – Campo de temperatura no forno cilíndrico. a) k- $\epsilon$  padrão e b) SST.

Para ambos modelos observa-se abaixo da saída do queimador, uma região de temperatura alta na região demarcada na Figura 4.20a e b, que diferem entre si para os dois modelos. Esta região está relacionada a propagação dos gases quentes que deixam a zona de recirculação, onde o processo de combustão ocorre e encontra um escoamento fortemente rotativo (*swirling flow*). Warzecha e Boguslawski (2014a) relatam que este fenômeno é mais visível no campo de temperatura instantânea onde ocorre valores elevados de temperatura

comparado aos valores médios. O perfil de temperatura instantânea mostra a natureza não permanente do processo de combustão do carvão. No presente trabalho não foi realizado a análise do campo de temperatura instantânea, regime não permanente.

A diferença da capacidade computacional entre os dois modelos, k- $\epsilon$  padrão e SST, são pequenas, devido à utilização do *cluster* para as suas simulações. As duas simulações levaram menos de 7 horas de solução. Portanto para uma análise preliminar, o modelo SST é utilizado por apresentarem resultados mais satisfatórios em tempos computacionais bem próximos.

Diante da discussão dos resultados no item 4.6, definiu-se a seleção da modelagem a ser utilizada; sendo esta seleção feita através da validação dos modelos de turbulência empregados em conjunto com os modelos de combustão e radiação. A seleção do modelo SST considerou que os resultados da validação na maior parte estão mais próximos dos resultados experimentais, para a velocidade, temperatura e fração volumétrica de O<sub>2</sub>. Com isso, a simulação do carvão nacional CE 5200, capítulo 5, utiliza esta modelagem.

Convém lembrar que os resultados numéricos obtidos por diferentes grupos de pesquisas apresentam uma discrepância quando comparados com os resultados experimentais, conforme relatados por Warzecha e Boguslawski (2014a), Toporov *et al.* (2008) e Kangwanpongpan (2013).

Além disso, a divergência entre os valores da simulação e os valores experimentais deve-se ao cálculo tridimensional em CFD, que traz consigo erros de discretização inerentes do método. Métodos de solução de problemas estão associados à erros de modelagem e numérico.

Erro de modelagem é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e a sua solução analítica. O erro de modelagem é causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno físico real na concepção dos modelos matemáticos. O processo para quantificar este tipo de erro é feito pela validação.

Erro numérico de uma variável de interesse é a diferença entre a sua solução analítica exata e a sua solução numérica. O objetivo da verificação é determinar em que medida um modelo matemático é solucionado de forma adequada através de um método numérico. Logo, a solução numérica ideal é igual à solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo (MARCHI, 2007).

Além disso, o erro numérico é causado pelas seguintes fontes (MARCHI, 2007):

- **Erro de truncamento:** origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático. Em geral, este erro se reduz com a diminuição do tamanho ( $h$ ) dos volumes de controle da malha.
- **Erro de iteração:** é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração. As equações discretizadas resultam das aproximações numéricas feitas sobre um modelo matemático. Em geral, o erro de iteração se reduz com o aumento do número de iterações.
- **Erro de arredondamento:** ocorre principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Ele aumenta com a redução de  $h$ .
- **Erro de programação:** inclui os erros causados por pessoas na discretização do modelo matemático, e na implementação e uso de um programa computacional.

## Capítulo 5

# RESULTADOS E ANÁLISE DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA EM CFD DO CARVÃO MINERAL NACIONAL

Este capítulo trata da simulação e análise dos resultados do carvão pulverizado nacional CE 5200, para o uso em termoelétricas. A análise feita é da substituição do carvão alemão Rhenish, utilizado na validação da oxi-combustão, capítulo 4, por um carvão brasileiro pulverizado.

### 5.1. Características do Carvão Nacional CE 5200

O carvão mineral selecionado para o estudo é o carvão beneficiado CE 5200, que é extraído no estado do Rio Grande do Sul. A

Tabela 5.1 apresenta as empresas que fazem a extração do carvão CE 5200, a localização geográfica (município), a mina e a produção em tonelada.

Tabela 5.1 – Produção do carvão mineral beneficiado CE 5200 por empresa, modificada do DNPM (2007).

| Empresa                | Município        | Mina      | Produção [t/ano] |
|------------------------|------------------|-----------|------------------|
| Copelmi Mineração      | Arroio dos Ratos | Faxinal   | 148.475          |
|                        | Butiá            | Recreio   | 187.434          |
| Companhia RioGrandense | Minas do Leão    | Boa Vista | 2.420            |

A escolha do carvão mineral CE 5200 foi devido ao seu alto poder calorífico, o qual está próximo do valor do carvão alemão Rhenish utilizado no capítulo 4, e assim não há necessidade de alterar as informações da cinética química do carvão (desvolatilização, oxidação do *char* e oxidação de materiais voláteis). Antes foi realizada uma pesquisa na literatura buscando informações da cinética química de outros tipos de carvões nacionais, porém não foram encontrados dados suficientes para realizar a simulação.

As demais propriedades do carvão como análise elementar, análise imediata e poder calorífico são obtidas do portfólio da Copelmi Mineração, onde o carvão deve estar dentro de uma faixa de valores determinados em contrato (SUNDSTROM, 2012). Para o caso empregado no ANSYS CFX, os valores são os valores médios da faixa estipulada no portfólio. Assim, os itens inseridos no ANSYS CFX para representar o carvão mineral beneficiado CE 5200 são: análise elementar, análise imediata e poder calorífico inferior, mostrados na Tabela 5.2.

Observa-se que existe uma diferença considerável da fração de cinzas e de material volátil na análise imediata entre o carvão brasileiro CE 5200 e o alemão. As cinzas do carvão nacional são de 30% enquanto do carvão alemão é de 4,1%. A fração de material volátil para o carvão nacional é de 29,5% e do carvão Rhenish é de 46,9%.

O tamanho da partícula do carvão mineral pulverizado, CE 5200, foi usado o mesmo do carvão alemão, 35 [ $\mu\text{m}$ ], ver Capítulo 4.

Tabela 5.2 – Propriedade do carvão mineral beneficiado CE 5200.

| Análise imediata          |       | Unidades |
|---------------------------|-------|----------|
| Carbono Fixo              | 39,0  | %        |
| Matéria Volátil           | 29,5  | %        |
| Cinzas                    | 30,0  | %        |
| Umidade                   | 1,5   | %        |
| Poder Calorífico Inferior | 21,76 | MJ/kg    |
| Análise elementar         |       | -        |
| C                         | 54,0  | %        |
| H                         | 3,5   | %        |
| O                         | 9,0   | %        |
| N                         | 0,85  | %        |
| S                         | 1,1   | %        |

## 5.2. Geometria Simulada

A simulação do carvão nacional CE 5200 pulverizado foi realizada utilizando no forno vertical de queda livre de 100 kW<sub>th</sub>, da Universidade de Aachen (TOPOROV *et al.*, 2008), Figura 4.1. Utilizou-se a geometria e as condições de contorno do experimento realizado com o carvão alemão linhito pulverizado Rhenish (KANGWANPONGPAN, 2013), apenas sendo alterada a vazão mássica de entrada de carvão e da mistura O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>.

Da mesma forma que foi feita com a validação no Capítulo 4, utilizou-se a geometria da seção de um quarto do forno, como mostra a Figura 4.3, desenvolvida em *Solidworks*, para a simulação numérica em CFD.

## 5.3. Malha Utilizada para Simulação do Carvão CE 5200

Para a simulação em CFD foi utilizada a mesma malha empregada na validação dos modelos no Capítulo 4 desenvolvido pelo programa *Meshing*, da ANSYS. Portanto, a malha



utilizada tem 1.827.000 elementos e 1.952.326 nós. Os elementos da malha na maioria são hexaédricos e o refinamento é feito nas regiões de interesse, como nas seções de entradas do forno e queimador, Figuras 4.4 e 4.5.

## 5.4. Modelos Utilizados na Simulação do Carvão CE 5200

Neste item apresenta-se os modelos utilizados para a simulação do carvão nacional pulverizado CE 5200, os quais são empregados no ANSYS CFX. Os modelos empregados foram os já avaliados na validação, capítulo 4, e que apresentaram melhores resultados. A Tabela 5.3 resume os modelos selecionados para a simulação do carvão CE 5200.

Tabela 5.3 - Modelos utilizados na simulação numérica para simulação do carvão CE 5200.

| Modelos               | Opções                                     |
|-----------------------|--|
| Turbulência           | SST  |
| Desvolatilização      | Badzioch e Hawksley                        |
| Reação do <i>char</i> | Field                                      |
| Reações dos voláteis  | Shaw <i>et al.</i> , Rückert <i>et al.</i> |
| Combustão             | EDFR                                       |
| Radiação              | DTM  |
|                       | MC   |

Os parâmetros utilizados no CFX ANSYS para representar a desvolatilização do carvão CE 5200 foi o mesmo para o carvão mineral Rhenish. Esse parâmetro é o mecanismo de um passo de Badzioch e Hawksley, em que a cinética química é mostrada na Tabela 4.9.

A reação do *char* é realizada reagindo com O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O. Os parâmetros do *char* são semelhantes ao utilizado no carvão Rhenish, Capítulo 4. Os parâmetros da cinética química são mostrados na Tabela 4.10.

Na oxidação dos voláteis realiza-se a oxidação de 3 passos, MV, CO e H<sub>2</sub> com o modelo EDFR, como foi realizado na validação da modelagem, Capítulo 4. As reações do MV, CO e H<sub>2</sub> são governadas pelos seguintes parâmetros: energia de ativação (E<sub>v</sub>), fator pré-exponencial

( $A_v$ ) e ordem de reação dos reagentes ( $\gamma$ ) de cada reação. A cinética química empregada, na simulação com o carvão nacional, é o caso 6 que está apresentado na Tabela 4.11 e 4.12, uma vez que foi o melhor caso para o carvão Rhenish. A Tabela 5.4 apresenta as reações dos voláteis e sua respectiva cinética química.

Tabela 5.4 - Parâmetros inseridos no CFX ANSYS para a oxidação dos voláteis.

| Reações  | $A_v [m^3 s^{-1} mol^{-1}]$ | $E_v [J/mol]$       | $\gamma$<br>(CH <sub>4</sub> , CO, H <sub>2</sub> ) | $\gamma_{O_2}$ |
|--|-----------------------------|---------------------|---|----------------|
| $MV + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO + 2 H_2O$ | $2,8 \times 10^9$           | $2,03 \times 10^5$  | -0,3  | 1,3            |
| $CO + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO_2$        | $2,91 \times 10^{12}$       | $1,67 \times 10^5$  | 0,25  | 1              |
| $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$       | $1,000 \times 10^8$         | $8,374 \times 10^3$ | 1   | 1              |

O modelo de radiação utilizado foi *discrete transfer* e as demais opções do modelo de radiação são os mesmos empregados na validação, Tabela 4.13. Enquanto que para as partículas considera-se o modelo Monte Carlo, MC, em que empregou-se os mesmos valores da validação.

## 5.5. Cálculo do Aporte Térmico

O cálculo do aporte térmico é necessário para se obter a mesma energia térmica do forno com o carvão CE 5200. Assim, são necessários trocar a vazão mássica de carvão e da mistura gasosa (sem alterar a razão  $O_2/CO_2$ ), em cada entrada.

Primeiro, obtém-se a relação oxigênio/carvão mineral estequiométrico,  $OC_{est\_Rhenish}$ , devido a queima do carvão Rhenish em um ambiente de  $O_2$ . Posteriormente, com os valores informados de vazão mássica do carvão Rhenish e mistura gasosa, Tabela 4.5, consegue-se obter a relação oxigênio/carvão real,  $OC_{real\_Rhenish}$ . Dessa forma, o excesso de ar,  $\alpha$ , é fornecido pela Equação (5.1).

$$\alpha = \frac{OC_{real} - OC_{est}}{OC_{est}} \quad (5.1)$$

Em seguida, com os elementos do carvão nacional CE 5200 tem-se a  $OC_{est\_est}$ . Utilizando o mesmo  $\alpha$ , quando queima o carvão alemão, obtêm-se o  $OC_{real\_real}$ .

Considerando que o tempo residual dos dois carvões é o mesmo. A vazão mássica do novo carvão,  $\dot{m}_{CE\ 5200}$ , é obtido através do balanço de energia, ou seja, isolando  $\dot{m}_{CE\ 5200}$  da Equação (5.2), tem-se:

$$E = \dot{m}_{Rhenish}PCI_{Rhenish} = \dot{m}_{CE\ 5200}PCI_{CE\ 5200} \quad (5.2)$$

Com os valores de  $\dot{m}_{CE\ 5200}$  e  $\alpha$ , a Equação (5.3) fornece a vazão mássica total de oxigênio que entra no forno.

$$\dot{m}_{O_2\ total} = \dot{m}_{CE\ 5200}\alpha \quad (5.3)$$

Em cada entrada mantendo a relação da fração mássica  $O_2/CO_2$  iguais da simulação numérica de validação, tem-se a Equação (5.4) para a determinação da vazão mássica de  $O_2$  em cada entrada.

$$\dot{m}_{O_2\ total} = 0,146\dot{m}_{O_2\ PS} + 0,162\dot{m}_{O_2\ SS} + 0,162\dot{m}_{O_2\ TS} + 0,162\dot{m}_{O_2\ Staging} \quad (5.4)$$

Assim, a determinação da vazão mássica de  $CO_2$  é obtida por:

$$\dot{m}_{CO_2\ total} = 0,854\dot{m}_{CO_2\ PS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ SS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ TS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ Staging} \quad (5.5)$$

Utilizando a mesma porcentagem de vazão mássica em cada entrada no caso do carvão Rhenish, tem-se:

$$\% \dot{m}_{ent} = \frac{\dot{m}_{ent}}{\dot{m}_{total}} = \frac{\dot{m}_{ent}}{\dot{m}_{O_2\ total} + \dot{m}_{CO_2\ total}} \quad (5.6)$$

A Tabela 5.5 mostra todos os parâmetros que são calculados até o momento da obtenção da vazão mássica do carvão mineral CE 5200.

Tabela 5.5 – Parâmetros calculados para obtenção da vazão mássica em cada entrada.

| Parâmetro              | Valor   | Unidade |
|------------------------|---------|---------|
| $OC_{est\_Rhenish}$    | 2,140   | [-]     |
| $OC_{real\_Rhenish}$   | 2,464   | [-]     |
| $\alpha$               | 0,15    | [-]     |
| $OC_{est\_CE\ 5200}$   | 1,73    | [-]     |
| $OC_{real\_CE\ 5200}$  | 1,99    | [-]     |
| $\dot{m}_{CE\ 5200}$   | 0,00046 | [kg/s]  |
| $\dot{m}_{O_2\ total}$ | 0,00092 | [kg/s]  |
| $\% \dot{m}_{PS}$      | 17,49   | [%]     |
| $\% \dot{m}_{SS}$      | 26,44   | [%]     |
| $\% \dot{m}_{TS}$      | 1,49    | [%]     |
| $\% \dot{m}_{staging}$ | 54,57   | [%]     |

Dessa forma, tem-se da Equação (5.6) para cada entrada as Equações (5.7), (5.8), (5.9) e (5.10).

$$0,1749 = \frac{\dot{m}_{PS}}{0,000917 + 0,854\dot{m}_{CO_2\ PS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ SS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ TS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ Staging}} \quad (5.7)$$

$$0,2644 = \frac{\dot{m}_{SS}}{0,000917 + 0,854\dot{m}_{CO_2\ PS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ SS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ TS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ Staging}} \quad (5.8)$$

$$0,0149 = \frac{\dot{m}_{TS}}{0,000917 + 0,854\dot{m}_{CO_2\ PS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ SS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ TS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ Staging}} \quad (5.9)$$

$$0,5457 = \frac{\dot{m}_{Staging}}{0,000917 + 0,854\dot{m}_{CO_2\ PS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ SS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ TS} + 0,838\dot{m}_{CO_2\ Staging}} \quad (5.10)$$

Aplicando o método de Gauss nas Equações (5.7), (5.8), (5.9) e (5.10), obtém-se as vazões mássicas para cada corrente de entrada, Tabela 5.6, na inserção do carvão mineral CE 5200, aplicado na simulação de  $\frac{1}{4}$  do forno.

Tabela 5.6 - Parâmetros de corrente de entrada utilizados no forno vertical para o carvão CE 5200.

| Entradas       | Vazão Mássica do CE 5200 ( $\frac{1}{4}$ da seção) [kg/s] | Vazão Mássica do Rhenish ( $\frac{1}{4}$ da seção) [kg/s] |
|----------------|---|---|
| Carvão         | 0,0004665   | 0,0004514   |
| PS             | 0,0010224   | 0,0012222   |
| SS             | 0,0015452   | 0,0018472   |
| TS             | 0,0000871   | 0,0001042   |
| <i>Staging</i> | 0,0031893   | 0,0038125   |

Portanto, os dados que foram alterados para realização da simulação em CFD com o carvão CE 5200, para manter o mesmo aporte térmico, são: análise elementar, análise imediata, poder calorífico do carvão, além das vazões mássicas na entrada primária, secundária, terciária e *staging*.

## 5.6. Resultados da Simulação no Forno de 100 kW com Carvão CE 5200

Os resultados da simulação numérica do carvão nacional CE 5200 são apresentados da seguinte forma: gráficos de velocidades, temperaturas, fração volumétrica de O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O ao longo do raio e comparadas com os resultados obtidos para o carvão Rhenish, visando avaliar a substituição do carvão Rhenish pelo carvão CE 5200 no processo de oxi-combustão.

Os resultados ao longo do raio para a velocidade axial foram realizados nas posições axiais de (1), (2), (3) e (4), enquanto que para as temperaturas e as frações volumétricas foram (2), (3), (4) e (5), Figura 4.6. Além disso, apresentam-se os campos de vetor velocidade e de temperatura.

As condições de contorno foram mantidas de acordo com capítulo 4 para a simulação do carvão mineral CE 5200, Tabelas 4.4, 4.6 e 4.7.

### 5.6.1. Velocidade axial ao longo dos raios

Os resultados da velocidade axial, obtidos na simulação do carvão CE 5200, são plotados em função do raio para as distâncias axiais do queimador de 0,025 [m], 0,05 [m], 0,2 [m] e 0,3 [m] e comparados com as velocidades obtidas na simulação do carvão Rhenish.

Nota-se na Figura 5.1, na distância axial 0,025 [m] do queimador, que o perfil de velocidade axial é semelhante para os dois carvões, porém valores diferenciam-se em algumas regiões.

No centro do forno até o raio 0,03 [m] para ambos os carvões a velocidade é negativa, ou seja, nessa região existe a presença de recirculação. O valor da velocidade axial no centro para os dois carvões CE 5200 e Rhenish são -3,0 [m/s] e -4,5 [m/s], respectivamente. Dessa forma, havendo uma recirculação menor para o carvão CE 5200 nesta distância axial.

A velocidade máxima para ambos ocorre próximo ao raio do *quarl* do queimador, no raio 0,046 [m] a velocidade axial de 7,0 [m/s] e no raio 0,047 [m] a velocidade axial de 7,7 [m/s], para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente. Isto é devido as vazões do PS e SS que são menores para o carvão CE 5200, decorrente do menor poder calorífico.

A velocidade axial torna-se negativa novamente para o carvão CE 5200 no raio 0,079 [m] criando uma outra região de recirculação até 0,179 [m], com velocidade mínima de -0,4 [m/s] no raio 0,127 [m]. Para o carvão Rhenish, o raio de abrangência da recirculação é maior na faixa de raio de 0,064 a 0,180 [m], com velocidades mínimas nesta região de -0,4 [m/s] no raio 0,145 [m]. Próxima a parede do forno, a velocidade axial atinge valores, para o carvão CE 5200 e Rhenish, de 2,4 [m/s] e 2,9 [m/s], respectivamente, no raio 0,196 [m] para ambos os casos. Existe uma redução de magnitude da velocidade axial do CE 5200 comparado ao Rhenish, devido à redução de vazão mássica no *staging*, em decorrência dos poderes caloríficos.

Em geral pode-se dizer para a distância axial 0,025 [m], que o campo de velocidade não altera muito para o carvão CE 5200, quando comparado com o carvão Rhenish.

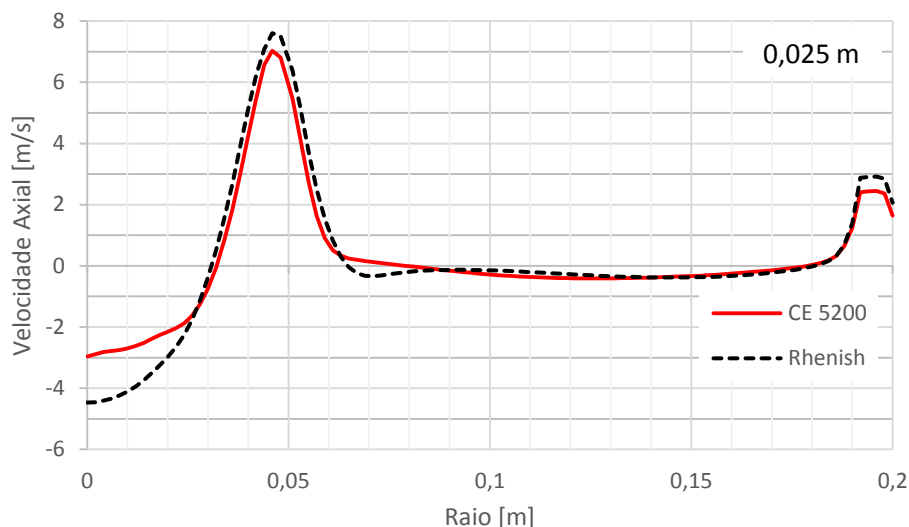


Figura 5.1 - Velocidade axial dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,025 [m] do queimador.

A Figura 5.2 mostra a velocidade axial à distância axial 0,05 [m] do queimador para o carvão mineral CE 5200 e Rhenish. O perfil de velocidade diverge um pouco até o raio 0,05 [m], onde fica a região do queimador no forno. No restante do raio, o perfil é semelhante.

Do centro do forno até o raio 0,027 [m], as velocidades são negativas, com valores mínimos de -3,83 [m/s] e -2,25 [m/s], para os carvões Rhenish e CE 5200, respectivamente. Assim, a recirculação do carvão CE 5200 é menos intensa na região central do forno do que a do carvão Rhenish.

A velocidade axial máxima para o carvão CE 5200 ocorre mais próxima ao *quarl* do queimador, no raio 0,048 [m] com valor de 6,43 [m/s] enquanto para o carvão Rhenish, no raio 0,045 [m], com valor de 6,48 [m/s].

A velocidade axial torna-se negativa novamente no carvão CE 5200, no raio 0,081 [m] criando uma região de recirculação até o raio 0,180 [m], com velocidade mínima de -0,68 [m/s] no raio 0,117 [m]. Para o carvão Rhenish a faixa de abrangência da recirculação é menor e está entre os raios 0,080 [m] e 0,174 [m], com velocidade mínima nesta região de -0,69 [m/s], no raio 0,142 [m]. Próxima à parede do forno, a velocidade axial volta a aumentar, para o carvão CE 5200, este valor é menor quando comparado ao Rhenish, 2,44 [m/s], no raio 0,196 [m] e 2,91 [m/s], no raio 0,195 [m], respectivamente. A partir do raio 0,048 [m] para a parede do forno, os dois perfis de velocidades são praticamente os mesmos.

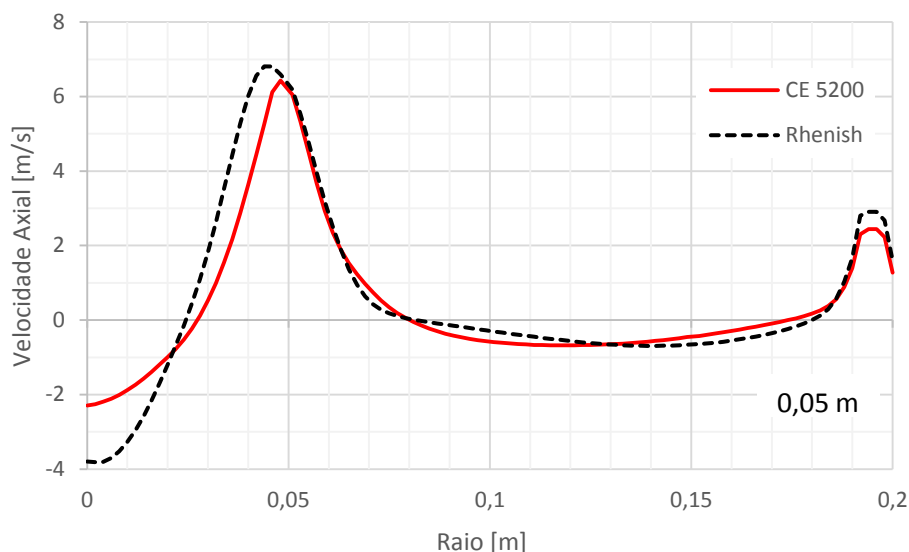


Figura 5.2 - Velocidade axial dos CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m].

A Figura 5.3 apresenta o perfil de velocidade axial, a distância axial 0,2 [m] do queimador, para os dois carvões, com diferenças de valores de velocidade ao longo do raio.

Nota-se na Figura 5.3, que do centro do forno até os raios 0,008 [m] e 0,013 [m], há uma discreta recirculação, com velocidade mínima de -0,1 [m/s] e -0,2 [m/s], para os carvões Rhenish e CE 5200, respectivamente. A velocidade axial máxima para o carvão CE 5200 e Rhenish ocorre no raio de 0,061 [m], valor de 2,7 [m/s], e no raio de 0,057 [m], valor de 4,07 [m/s], respectivamente.

Observa-se na Figura 5.3 que a velocidade axial do carvão CE 5200, a partir do raio 0,140 [m], fica negativa até a parede do forno, com velocidade mínima de -0,4 [m/s] no raio 0,190 [m]. Para o carvão Rhenish, a velocidade axial fica negativa no raio 0,180 [m] até a parede do forno, com valor de velocidade mínima de -0,5 [m/s], no raio 0,195 [m], e neste caso a recirculação se define mais próxima a parede do forno com maior intensidade do que a recirculação do CE 5200.

A Figura 5.3 mostra que o carvão CE 5200, próximo ao centro do forno, tem velocidade praticamente igual a velocidade do carvão Rhenish. A faixa da velocidade axial positiva é maior do CE 5200 do que o carvão Rhenish.



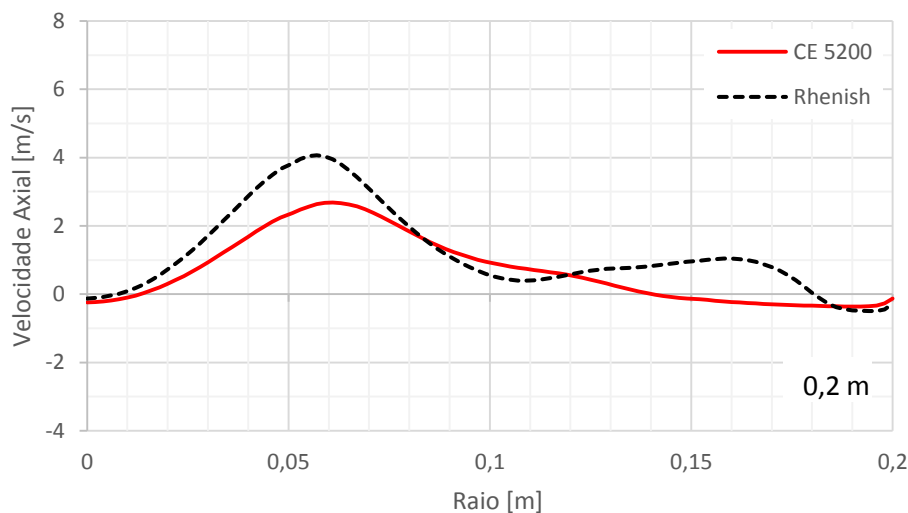


Figura 5.3 - Velocidade axial dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m].

A Figura 5.4 mostra a velocidade axial na distância axial 0,3 [m] do queimador para os carvões CE 5200 e Rhenish. Nota-se que as velocidades axiais apresentam perfis semelhante, havendo uma maior diferença de valor para a região de raio entre 0,05 e 0,1 [m].

Nota-se na Figura 5.4 que a velocidade axial máxima para o carvão CE 5200 ocorre no raio de 0,083 [m], valor de 1,6 [m/s], e para o carvão Rhenish, no raio de 0,072 [m], o valor máximo de 2,5 [m/s]. A velocidade axial torna-se negativa para ambos os carvões em 0,158 [m], criando uma região de recirculação até a parede, com velocidade mínima de aproximadamente -0,4 [m/s] em 0,196 [m].

Comparando o resultado da simulação da velocidade axial entre os carvões mineral CE 5200 e Rhenish, as Figuras 5.1 e 5.2, com distância axial 0,025 [m] e 0,05 [m] do queimador têm-se a diferença nas velocidades axial próxima a faixa do centro do forno e para as Figuras 5.3 e 5.4, as diferenças da velocidade axial encontram-se no raio de saída do *quarl*. As diferenças nos perfis de velocidade axial devem-se ao aporte térmico que altera as vazões e consequentemente as velocidades e as recirculações. De forma geral, os perfis de velocidade axial têm bastante semelhança, ou seja, pode-se considerar que têm características aerodinâmicas similares entre ambos os carvões.

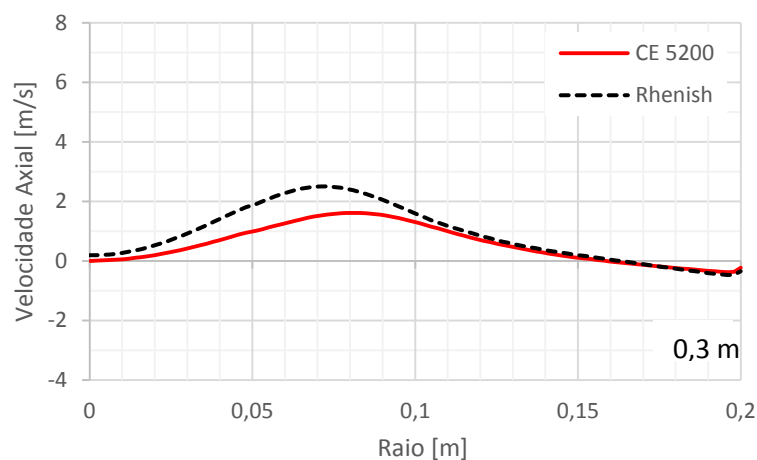


Figura 5.4- Velocidade axial dos CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m].

A Figura 5.5 mostra os campos do vetor velocidade axial no plano longitudinal central para as simulações da oxi-combustão dos carvões pulverizados CE 5200, Figura 5.5a, e Rhenish, Figura 5.5b. A Figura 5.5b é a mesma do campo de vetor de velocidade axial utilizada para a validação do modelo de turbulência SST, Figura 4.19. As linhas na horizontal representam as posições de medição dos gráficos.

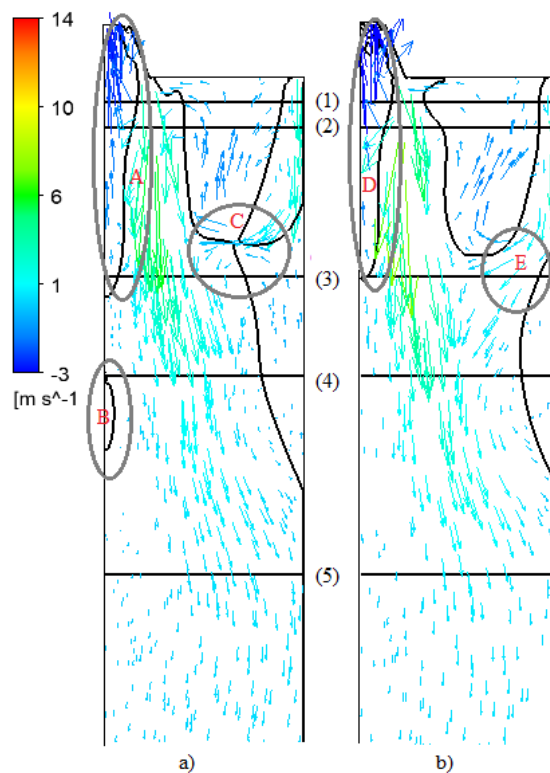


Figura 5.5 – Campo de velocidade axial para os carvões (a) CE5200 e (b) Rhenish.

Observa-se que as velocidades axiais positivas propagam-se na mesma direção para os dois carvões, Figura 5.5a e b. Da Figura 5.5a, carvão CE 5200, as velocidades axiais na região central do forno; são mostradas na região A possuem similaridade com o carvão Rhenish, região D, Figura 5.5b. Na região C e E a recirculação é diferente, devido a vazão mássica ser diferente em cada entrada. Existe uma pequena recirculação no carvão CE 5200 na região B, Figura 5.5a, que o carvão Rhenish não tem, localizada logo abaixo da linha (4). Além disso, tem-se a recirculação entre a entrada terciária e o *staging*.

### 5.6.2. Temperatura ao longo dos raios

Os resultados da temperatura obtida na simulação do carvão CE 5200 são plotados em função do raio, para as distâncias axiais do queimador de 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] e comparados com as temperaturas obtidas na simulação do carvão Rhenish.

A Figura 5.6 mostra os resultados da distribuição da temperatura para o carvão CE 5200 e o carvão Rhenish, na distância axial 0,05 [m]. Nota-se na Figura 5.6 que os perfis de temperatura são semelhantes a partir do raio 0,080 [m] até a parede do forno com temperatura na parede de 1221 [K] e 1217 [K], carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente.

No eixo central do forno até o raio de 0,05 [m] a diferença mínima e máxima entre os carvões CE 5200 e Rhenish é de 223 [K] no centro do forno, e de 6 [K] no raio 0,04 [m], respectivamente. As temperaturas do carvão CE 5200 no centro do forno é de 1390 [K] e no raio 0,04 [m] o valor é de 1216 [K].

Observa-se na Figura 5.6 que a menor temperatura para ambos ocorre próximo ao *quarl* do queimador para os carvões CE 5200 e Rhenish com temperatura 1016 [K] e 1013 [K], nos raios 0,046 [m] e 0,044 [m], respectivamente. Nesses raios, as velocidades axiais são de 6,1 [m/s] e de 6,8 [m/s], para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente.

A temperatura máxima para o carvão CE 5200 está no centro do forno com o valor de 1391 [K], e para o carvão Rhenish o valor máximo da temperatura é de 1588 [K] no raio 0,066 [m].

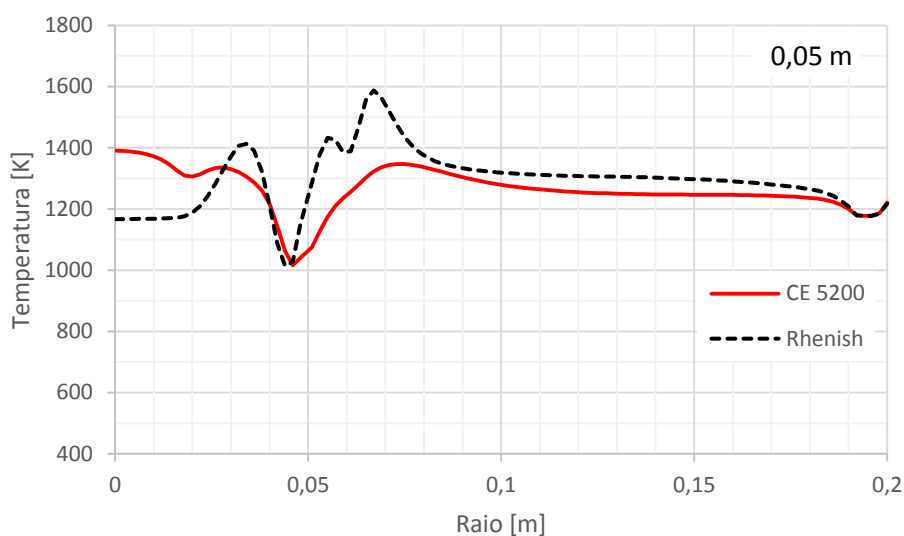


Figura 5.6 – Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m].

A Figura 5.7 mostra o resultado da distribuição da temperatura, na distância axial de 0,2 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Os perfis de temperatura para cada carvão são diferentes até o raio 0,123 [m] e, a partir deste raio até a parede existe uma semelhança, com diferença máxima de temperatura de 23 [K].

Nota-se na Figura 5.7 que no eixo central do forno, a temperatura para o carvão mineral CE 5200 é de 1392 [K], sendo a maior temperatura, e a temperatura do carvão Rhenish é de 1321 [K]. Do centro até o raio de 0,05 [m], o carvão CE 5200 inicia-se com uma temperatura maior e diminui até o raio 0,05 [m] onde a temperatura é de 1239 [K], sendo a menor temperatura. O carvão Rhenish tem o comportamento oposto, sendo a temperatura no centro do forno de 1313 [K] e no raio 0,05 [m] de 1448 [K].

Observa-se na Figura 5.7 que a maior temperatura para o carvão Rhenish ocorre no raio 0,063 [m] com o valor de 1530 [K].

No raio 0,123 [m] existe a menor diferença entre os dois carvões que é de 1,5 [K]. Deste raio até a parede os dois carvões têm os perfis de temperatura semelhante, com temperatura na parede de 1274 [K] e 1281 [K], para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente.

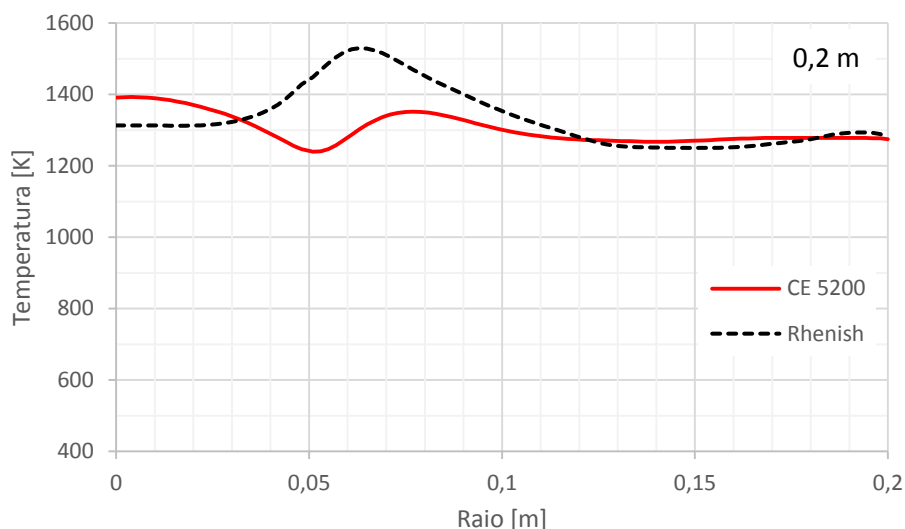


Figura 5.7 – Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m].

A Figura 5.8 mostra o resultado da distribuição da temperatura na distância axial 0,3 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish, tendo semelhança de perfis, com exceção na região entre 0,06 [m] e 0,103 [m].

Nota-se na Figura 5.8 que do centro do forno até o raio 0,059 [m], os valores das temperaturas decrescem de forma suave para o carvão CE 5200, e levemente ascendentes para o carvão Rhenish, com diferença máxima de temperatura de 37 [K] no raio 0,026 [m].

No intervalo dos raios 0,060 a 0,103 [m], as temperaturas do carvão Rhenish aumentam até o valor máximo de 1488 [K] no raio 0,079 [m] e em seguida diminuem até o valor de 1347 [K] no raio 0,103 [m]. Para o carvão CE 5200, os valores de temperaturas neste intervalo têm um comportamento diferente, diminuindo de um valor de 1349 [K], no raio 0,06 [m], para o valor de 1305 [K], no raio 0,103 [m].

A menor diferença de temperatura se verifica para o raio 0,117 [m], onde o valor é de 0,48 [K]. Portanto, pode-se dizer que os carvões CE 5200 e Rhenish têm o mesmo valor de temperatura de 1281 [K]. Na parede do forno, as temperaturas são de 1278 [K] e 1308 [K] para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente.

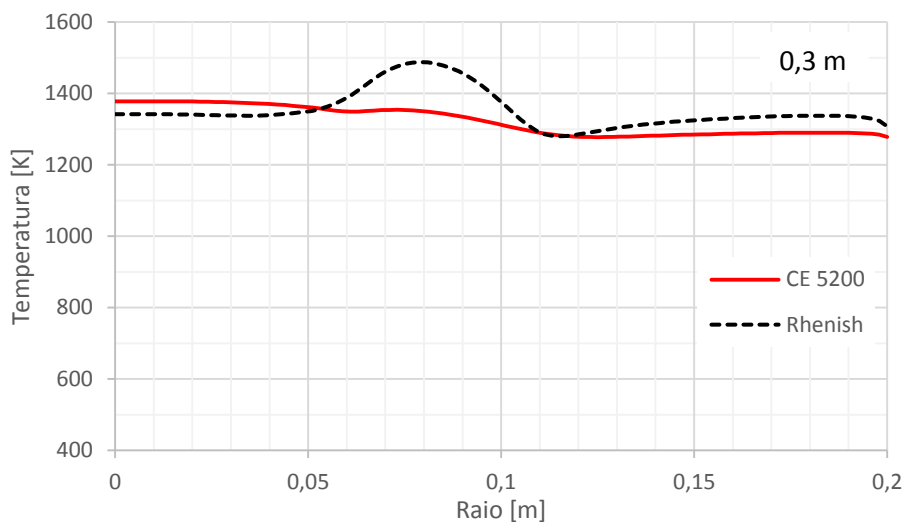


Figura 5.8 - Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m].

A Figura 5.9 mostra o resultado da distribuição da temperatura, na distância axial 0,5 [m] do queimador, para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Observa-se na Figura 5.9 que os perfis de temperatura são semelhantes para os dois carvões, com valor mínimo de temperatura na parede do forno de 1288 [K] e 1315 [K], para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente. O valor máximo de temperatura é de 1310 [K] e 1405 [K], para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente. As diferenças mínimas e máxima dos carvões CE 5200 e Rhenish são 28 [K] e 101 [K], nos raios 0,2 [m] e 0,123 [m], respectivamente.

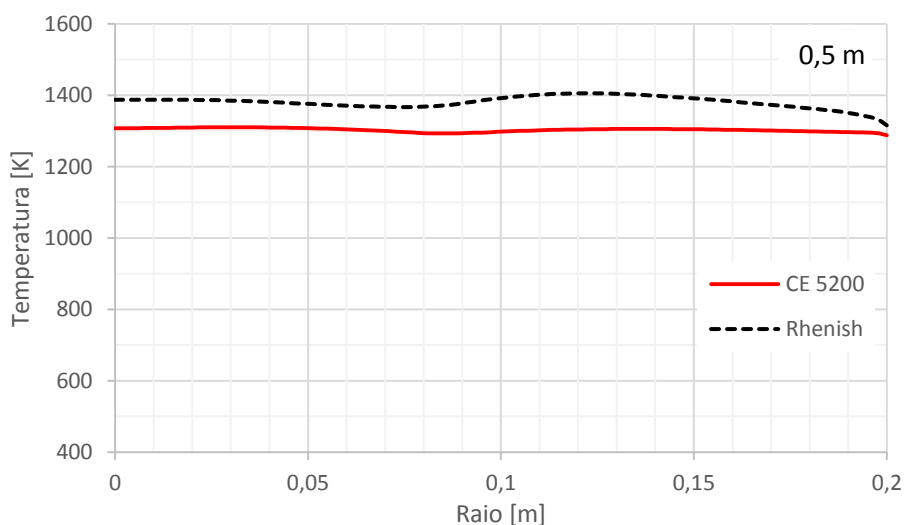


Figura 5.9 - Temperatura dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m].

A Figura 5.10 mostra os campos de temperatura no plano longitudinal central para as simulações da oxidação dos carvões pulverizados CE 5200, Figura 5.10a, e Rhenish, Figura 5.10b. A Figura 5.10b é a mesma do campo de temperatura utilizado para validação do modelo de turbulência SST, Figura 4.20. As linhas na horizontal representam as posições de medição dos gráficos de temperatura.

Observa-se que as temperaturas para o carvão CE 5200 são menores do que o carvão Rhenish e mais uniformes ao longo do forno. Nas regiões A, B e C, Figura 5.10a, apresentam as maiores temperaturas entre 1384 a 1450 [K], enquanto no carvão Rhenish as maiores temperaturas estão entre 1517 a 1650 [K] e localizam-se na região D, Figura 5.10b. Observa-se que os dois carvões CE 5200 e Rhenish possuem temperaturas uniformes e com valores próximos, abaixo da linha horizontal (5), a 0,5 [m].

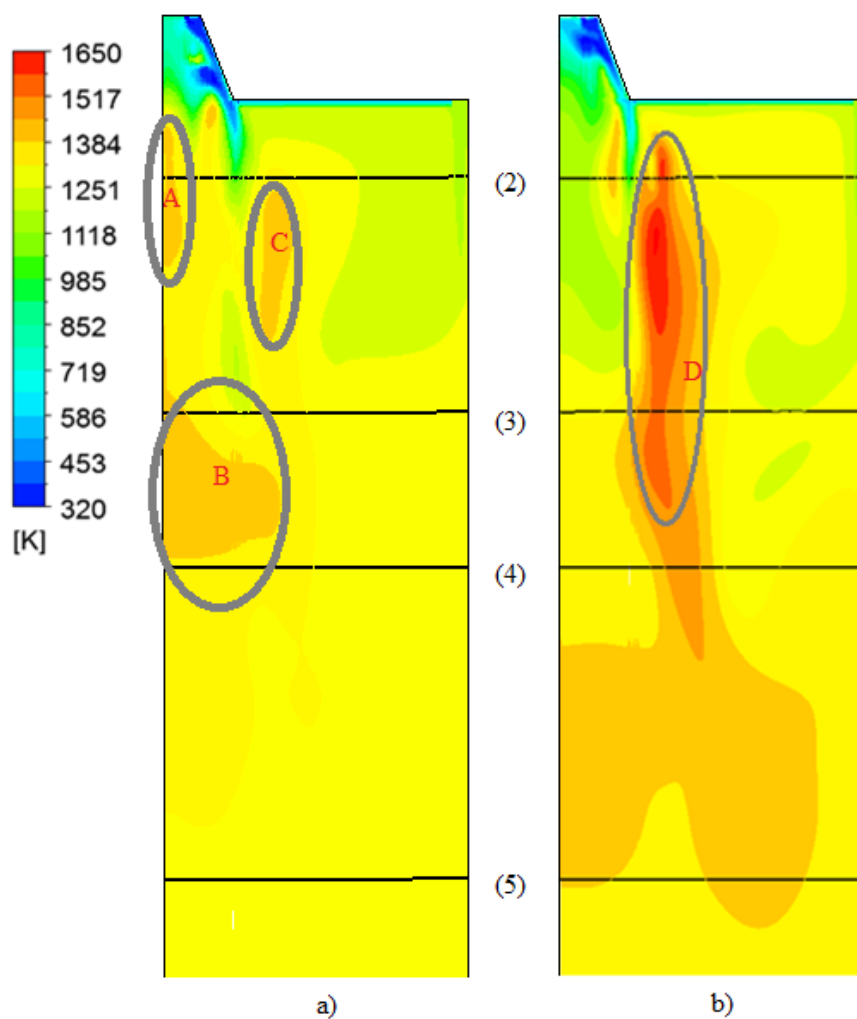


Figura 5.10 – Campo de temperatura dos carvões a) CE 5200 e b) Rhenish

Pode se dizer com base nos resultados de temperatura, que o comportamento térmico dos dois carvões é muito próximo e, que as diferenças são decorrentes do cálculo do aporte térmico, que altera as vazões e conseqüentemente as velocidades e as recirculações no interior do forno.

No que diz respeito a distribuição de temperatura dentro do forno para as posições analisadas, o carvão Rhenish pode ser substituído pelo carvão CE 5200 no processo de oxidação.

Outro aspecto importante a ser considerado na análise do perfil de temperatura são as cinzas. As cinzas remanescentes da combustão do carvão consistem em mistura complexa de fases cristalinas e amorfas sem um ponto de fusão definido. Essa parcela inorgânica do carvão se caracteriza por agregar em sua composição uma grande diversidade de óxidos, entre eles:  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{K}_2\text{O}$  e  $\text{Na}_2\text{O}_3$ , sendo que a temperatura de fusão da cinza está associada a composição química (óxidos).

Assim, caso o forno possua uma temperatura maior que a de fusão da cinza, a mesma irá formar uma lama que irá escoar para as partes mais frias do forno, causando problemas de incrustação e, conseqüentemente paradas não programadas da unidade de geração, o que aumenta a indisponibilidade da planta e o custo operacional.

A transformação física do carvão CE 5200 inicia-se, em média, a uma temperatura de 1636 [K], onde se observa o ponto de deformação, e se estende até 1818 [K], em média, sendo esta temperatura o ponto de fusão (JOÃO *et al.*, 2017).

Logo, a análise da temperatura realizada, para o carvão CE 5200, demonstra que a temperatura máxima que o forno atinge é igual ou inferior a 1400 [K], a qual está abaixo da temperatura de fusão de 1818 [K]. Isto é mais um item que aponta a viabilidade técnica do uso do carvão CE 5200 no processo de oxidação em caldeiras de centrais termelétricas a carvão.

### 5.6.3. Fração volumétrica de $\text{O}_2$ ao longo dos raios

A Figura 5.11 mostra o resultado da distribuição da fração volumétrica de  $\text{O}_2$  em função do raio, na distância axial de 0,05 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish.



Nota-se na Figura 5.11, que os perfis de fração volumétrica de  $O_2$  estão próximos em duas regiões, do centro até o raio 0,048 [m] e do raio 0,075 [m] até a parede. A diferença entre as curvas das frações volumétricas está entre os raios 0,048 e 0,075 [m]. Neste intervalo de raio, a maior diferença de fração volumétrica de  $O_2$  é de 8,9%, no raio 0,061 [m].

Do eixo central do forno até o raio de 0,048 [m], a diferença máxima da fração volumétrica de  $O_2$  entre o carvão CE 5200 e o carvão Rhenish é de 3,6% em 0,032 [m] e a mínima é de 1,9% em 0,046 [m]. Entre o raio 0,160 [m] e a parede as duas curvas coincidem.

Nota-se na Figura 5.11 que próximo ao centro do forno os valores das frações volumétricas do  $O_2$  são menores quando comparados com os valores da parede do forno e que os valores da fração volumétrica do  $O_2$  para o carvão CE 5200 são superiores aos valores do carvão Rhenish, faixa do centro até o raio 0,160 [m]. Do raio 0,160 [m] até a parede os valores das frações volumétricas do  $O_2$  para os dois carvões, são os mesmos, sendo que na parede o valor é de 21%.

O baixo valor das frações volumétricas de  $O_2$  na região central do forno é devido ao processo de combustão que é mais intenso nesta região e o consumo de oxigênio é maior, o que não ocorre na parede do forno. As diferenças entre os valores da fração volumétrica de  $O_2$  entre os dois carvões ocorrem devido as vazões de entrada, que são diferentes decorrentes do cálculo do aporte térmico.

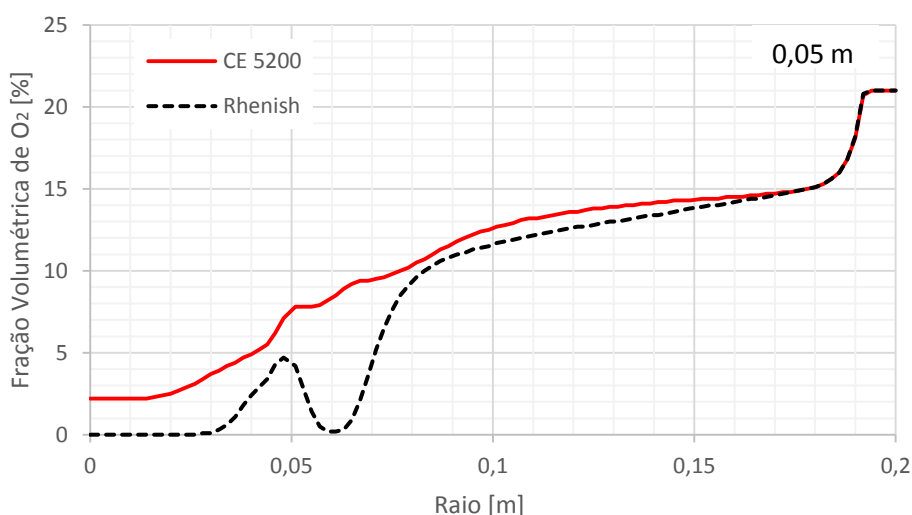


Figura 5.11 – Fração volumétrica de  $O_2$  dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador.

A Figura 5.12 mostra o resultado da distribuição da fração volumétrica de  $O_2$  em função do raio na distância axial de 0,2 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish.

Do eixo central do forno até o raio de 0,048 [m] observa-se que a fração volumétrica de  $O_2$  é muito pequena, entre 0,7% e 1,2%, para o carvão CE 5200, e para o carvão Rhenish, o valor da fração volumétrica é próximo de 0%.

Nota-se na Figura 5.12, do centro do forno até o raio 0,105 [m], o carvão CE 5200 têm valores da fração volumétrica de  $O_2$ , um pouco superior ao carvão Rhenish, sendo a maior diferença de 1,6%, no raio 0,06 m. De 0,105 [m] até 0,182 [m], os valores da fração volumétrica de  $O_2$  do carvão Rhenish são superiores, atingindo uma diferença máxima, neste intervalo, de 2,7%, no raio 0,170 [m]. De 0,105m até a parede, os valores da fração volumétrica de  $O_2$  do carvão CE 5200 são maiores do que os valores do carvão Rhenish, e o valor da fração volumétrica de  $O_2$  na parede é de 10,5%.

Assim como foi discutido para a distância axial de 0,05 [m], Figura 5.11, o baixo valor de fração volumétrica de  $O_2$  na região central do forno, é devido ao processo de combustão que é mais intenso nesta região e o consumo de  $O_2$  é maior, o que não ocorre na parede do forno. As diferenças entre os valores das frações volumétricas de  $O_2$  entre os dois carvões ocorrem devido as vazões de entrada, que são diferentes entre eles, decorrentes do cálculo do aporte térmico.

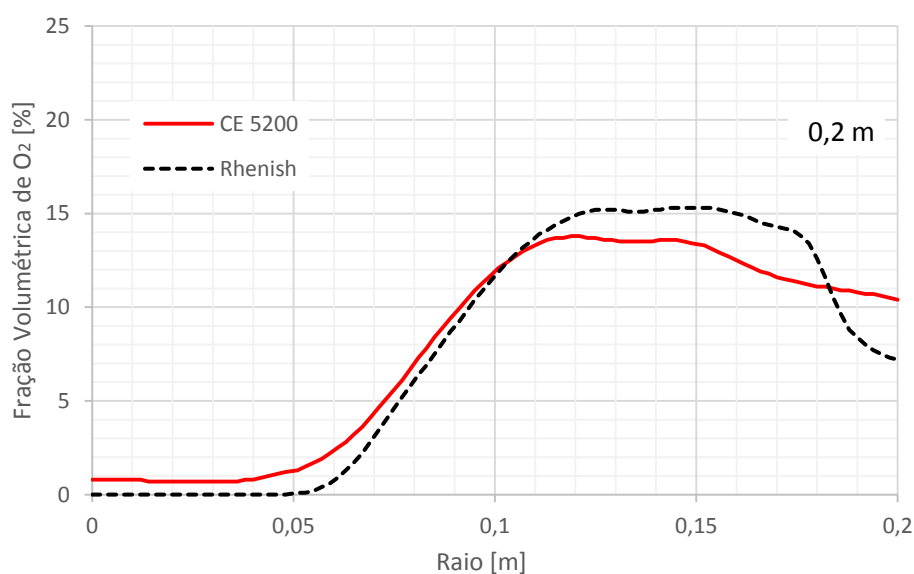


Figura 5.12 – Fração volumétrica de  $O_2$  dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador.

A Figura 5.13 mostra o resultado da distribuição das frações volumétricas de  $O_2$  em função do raio, na distância axial de 0,3 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Verifica-se na Figura 5.13 que os perfis das frações volumétricas de  $O_2$  têm semelhança ao longo de todo o raio.

Do eixo central do forno até o raio de 0,051 [m] observa-se que a diferença da fração volumétrica máxima entre o carvão CE 5200 e o carvão Rhenish é de 4% em 0,051 [m] e a diferença da fração volumétrica mínima é de 3,4%, na faixa de 0,0 a 0,026 m. Entre os raios 0,0 [m] e 0,051 [m], a fração volumétrica de  $O_2$  para o carvão Rhenish é próxima de zero.

Nota-se na Figura 5.13 que a partir do raio 0,051 [m] a fração volumétrica de  $O_2$  aumenta para ambos os carvões, atingindo o máximo valor de 14,1%, no raio 0,120 [m] para o carvão CE 5200, e o valor de 15,5%, no raio 0,111 [m] para o carvão Rhenish.

Após o valor máximo, as frações volumétricas de  $O_2$  diminuem até a parede para ambos os carvões minerais. A fração volumétrica do CE 5200 na parede é de 10,3%, e de 7,1% para o carvão Rhenish, sendo a diferença das frações volumétricas de  $O_2$  entre eles de 3,2%.

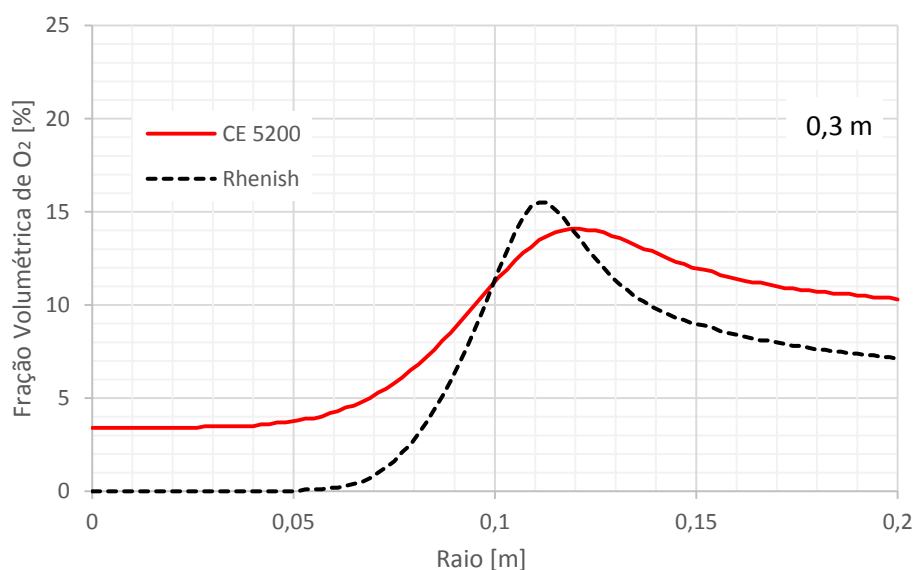


Figura 5.13 – Fração volumétrica de  $O_2$  dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador.

A Figura 5.14 apresenta as frações volumétricas de  $O_2$  versus o raio para a distância axial de 0,5 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Os perfis das frações volumétricas de  $O_2$ , para cada carvão pulverizado têm a forma semelhante.

Nota-se na Figura 5.14 que no eixo central do forno tem-se a mínima fração volumétrica de  $O_2$  e na parede a máxima fração volumétrica de  $O_2$  para ambos os carvões, sendo a fração volumétrica de  $O_2$  no centro de 6,8% e 0,5%, e na parede de 9,2% e 4,9% para os carvões CE 5200 e Rhenish, respectivamente.

A diferença máxima e mínima da fração volumétrica do carvão Rhenish em comparação ao carvão CE 5200 também estão localizados nas extremidades do forno. No centro do forno, a máxima diferença é de 6,3% e na parede a mínima diferença é de 4,3%.

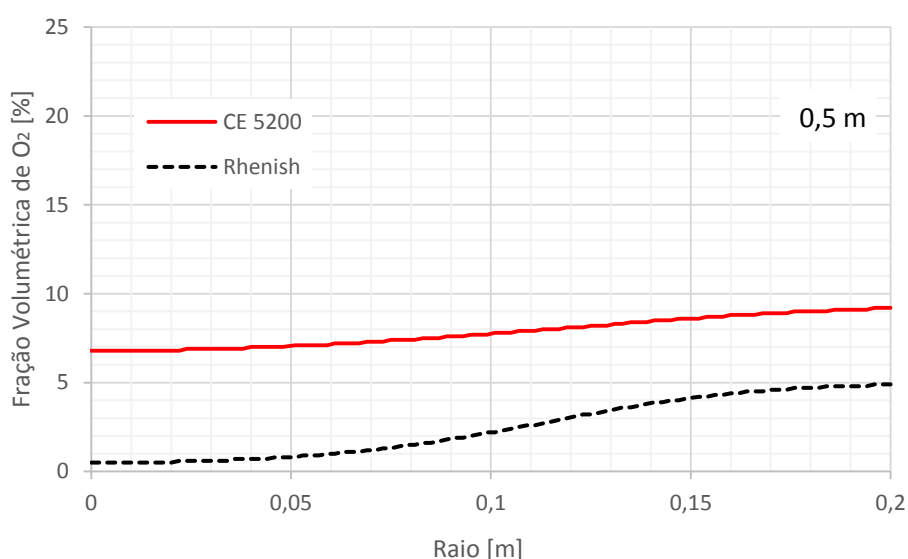


Figura 5.14 – Fração volumétrica de  $O_2$  dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador.

Da distância axial 0,05 [m] até a distância axial 0,5 [m], na região central do forno, caracterizada pela formação da chama, a quantidade de  $O_2$  varia de uma fração volumétrica de 2,2% na distância axial 0,05 [m], em seguida reduz para 0,8%, na distância axial 0,2 [m] e retorna à aumentar para 3,4% na distância axial de 0,3 [m], para o carvão CE 5200. Isto acontece porque no início da chama, o processo de combustão está iniciando, pouco combustível está sendo queimado e à medida que a combustão avança a quantidade de  $O_2$  diminui, pois, a quantidade de combustível queimado é maior, e possui no final da chama, a quantidade de combustível queimado é menor e, por isso, a quantidade de  $O_2$  volta a aumentar. Este fenômeno pode ser observado nas Figuras 5.11 a 5.14 e que o valor da fração volumétrica de  $O_2$  do carvão CE 5200 é sempre maior do que o carvão Rhenish em todas elas, na região central.

#### 5.6.4. Fração volumétrica de CO ao longo dos raios

Os resultados da fração volumétrica de CO versus o raio são apresentados para as distâncias axiais de 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m], comparando as frações volumétricas de CO encontrados nas simulações do carvão mineral brasileiro pulverizado CE 5200 com a do carvão Rhenish.

A Figura 5.15 apresenta a fração volumétrica de CO versus o raio para a distância axial de 0,05 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Os perfis das frações volumétricas de CO, para cada carvão pulverizado, têm um contorno similar.

Nota-se na Figura 5.15 que os perfis das frações volumétricas de CO têm maiores similaridades na faixa de raio de 0,075 [m] até a parede do forno, enquanto que do centro do forno até o raio 0,075 [m], a diferença máxima das frações volumétricas de CO é de 6,5%, no raio 0,063 [m].

Do eixo central do forno até o raio de 0,075 [m], têm-se o valor máximo da fração volumétrica de CO do carvão CE 5200 de 9,2% nos raios entre 0,014 [m] e 0,022 [m] e o valor mínimo de 4,1% no raio 0,063 [m]. Os valores das frações volumétricas de CO do carvão CE 5200 são menores do que o carvão Rhenish.

Na região de raio de 0,075 a 0,2 [m] existe pouca diferença da fração volumétrica de CO com valor abaixo de 1%. A queda da fração volumétrica de CO até a parede é mais suave do que do centro ao raio 0,075 [m]. Entre os raios 0,075 e 0,2 [m], o carvão CE 5200 tem fração volumétrica de CO de 3,1 a 0%.

Na região central do forno, para ambos os carvões, a quantidade de CO é maior do que a região próxima a parede devido à falta de O<sub>2</sub> no centro do forno, sendo que o carvão CE 5200 apresenta valores menores da fração volumétrica nesta região.

A Figura 5.16 mostra a fração volumétrica de CO, para a distância 0,2 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Nota-se na Figura 5.16 que o perfil de fração volumétrica de CO tem maior proximidade na faixa de raio de 0,07 [m] até a parede do forno, enquanto que do centro do forno até 0,07 [m], as diferenças entre os perfis são maiores e a diferença máxima das frações volumétricas de CO é de 3,6%, na posição do centro do forno.

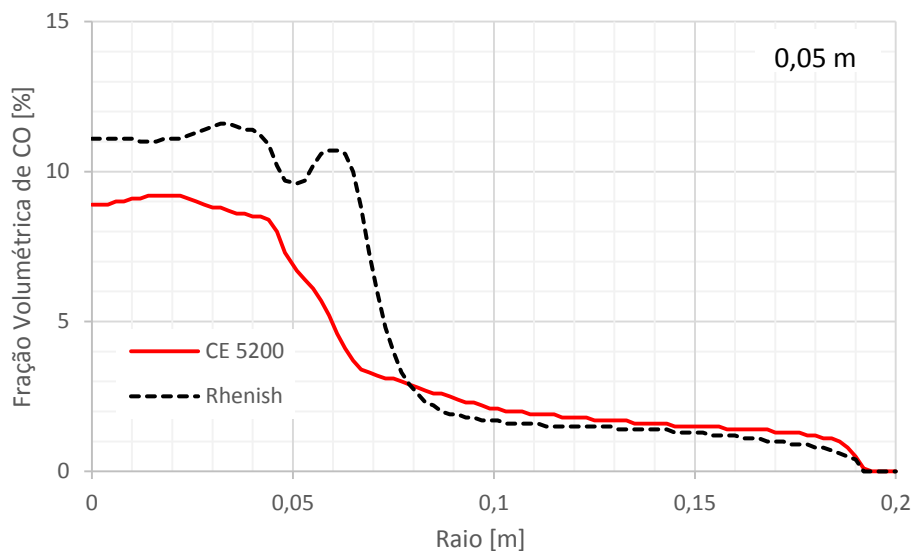


Figura 5.15 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador.

No eixo central do forno até o raio de 0,07 [m], têm-se o valor máximo da fração volumétrica de CO do carvão CE 5200 de 7,5% nos raios entre 0,038 [m] e 0,042 [m] e mínimo de 5,8% em 0,07 m. As frações volumétricas de CO do carvão CE 5200 são menores do que o carvão Rhenish. Observa-se na Figura 5.16 que fração volumétrica de CO, nesta região comparado com a distância axial 0,05 [m] (Figura 5.15) do queimador, é menor, ou seja, a combustão começa a se intensificar na distância axial 0,2 [m].

Na faixa de raio de 0,07 a 0,2 [m], existe pouca diferença das frações volumétricas de CO, com o valor abaixo de 1%. A queda da fração volumétrica de CO até a parede é menos acentuada do que entre os raios 0,0 [m] e 0,07 [m]. A fração volumétrica de O<sub>2</sub> do carvão CE 5200 nesse intervalo do raio varia entre 5,1% a 0,6%.

A Figura 5.17 mostra o gráfico da fração volumétrica de CO versus o raio do forno, para ambas as simulações dos carvões pulverizado CE 5200 e Rhenish, na distância axial 0,3 [m] do queimador. Nota-se na Figura 5.17 que os perfis de frações volumétricas de CO têm maior similaridade na faixa de raio de 0,085 [m] até a parede do forno, enquanto que do centro do forno até 0,085 [m] há uma diferença de frações volumétricas de CO de até 4,5%, na posição do centro do forno.

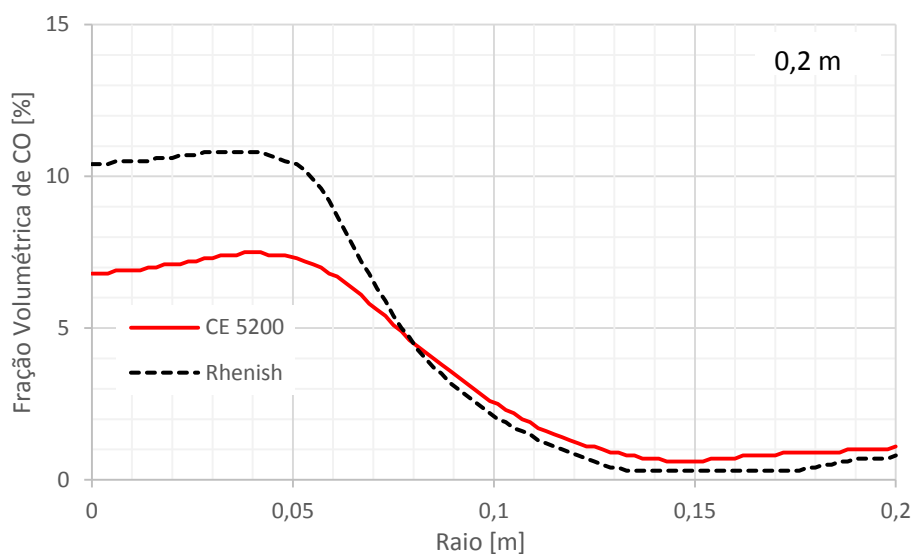


Figura 5.16 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador.

Do eixo central do forno até o raio de 0,085 [m], o valor máximo da fração volumétrica de CO do carvão CE 5200 é de 5,2%, entre os raios 0,044 [m] e 0,065 [m], e o valor mínimo é de 4,3%, no raio 0,085 [m]. As frações volumétricas de CO do carvão CE 5200 são menores do que o carvão Rhenish entre os raios 0,00 até 0,095 [m].

Na região de raio entre 0,085 a 0,2 [m] existe uma diferença menor, entre os carvões, da fração volumétrica de CO, com valores abaixo de 1,4%. A queda da fração volumétrica de CO entre os raios 0,06 e 0,12 [m] é menos acentuada para o carvão CE 5200. Próxima a parede a fração volumétrica de CO é de 1,4% para ambos os carvões.

A Figura 5.18 apresenta a fração volumétrica de CO versus o raio do forno na distância axial de 0,5 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Os perfis da fração volumétrica de CO para cada carvão pulverizado são de formas semelhantes. Observa-se na Figura 5.18 que os perfis das frações volumétricas de CO são mais próximos na faixa de 0,121 [m] até a parede do forno, enquanto que do centro do forno até 0,121 [m], as diferenças de fração volumétrica de CO é de até 2,4%, no centro do forno.

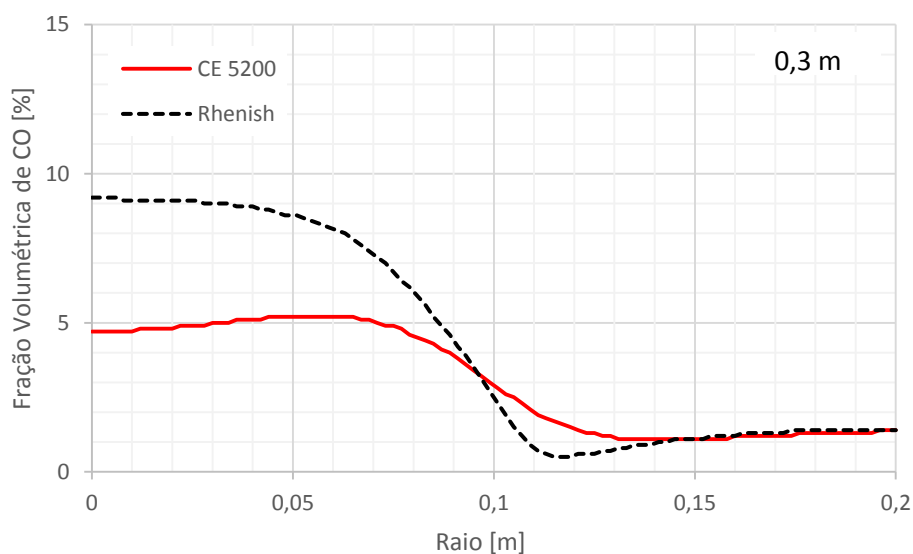


Figura 5.17 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador.

Na faixa de raio de 0,063 até 0,131 [m], têm-se o valor máximo da fração volumétrica de CO do carvão CE 5200 de 2,4% e o valor mínimo de 1,8% na parede do forno. As frações volumétricas de CO do carvão CE 5200 são menores do que o carvão Rhenish e iguais na parede.

Na região de raio de 0,121 a 0,2 [m] existe pouca diferença de fração volumétrica de CO com o valor abaixo de 1%. O perfil da fração volumétrica de CO do carvão CE 5200 é praticamente constante do centro a parede do forno.

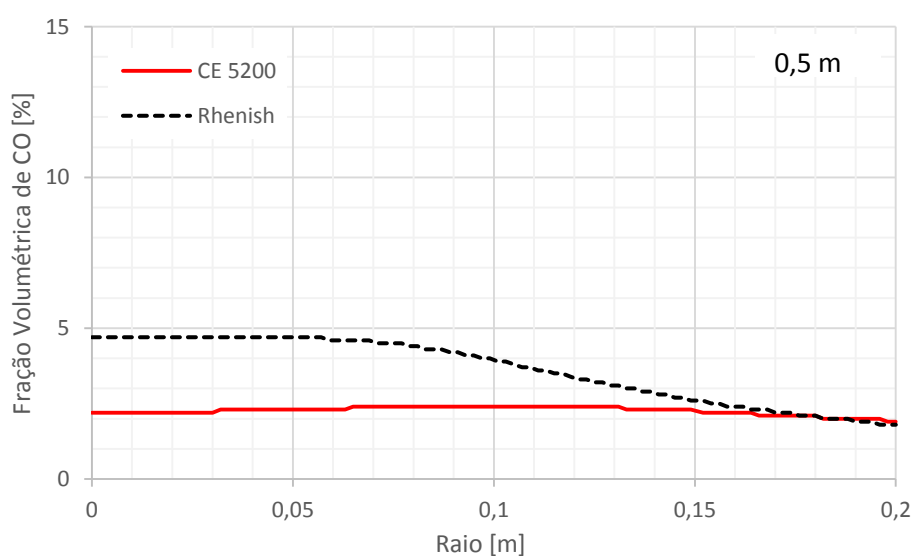


Figura 5.18 – Fração volumétrica de CO dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador.



Da distância axial 0,05 [m] até a distância axial 0,5 [m], na região central do forno, caracterizada pela formação da chama, a quantidade de CO varia de uma fração volumétrica de 8,9% na distância axial 0,05 [m], em seguida se reduz para 6,8%, na distância axial 0,2 [m], continua reduzindo para 4,7% na distância axial de 0,3 [m], e finalmente para 2,2%, na distância axial de 0,5 [m] para o carvão CE 5200. Isto acontece porque no início da chama o processo de combustão está se iniciando; pouco combustível está sendo queimado e à medida que a combustão avança a quantidade de CO diminui, pois, a quantidade de combustível queimado é maior e o processo químico da oxidação se completa. Este fenômeno pode ser observado nas Figuras 5.15 a 5.18 e que o valor da fração volumétrica de CO do carvão CE 5200 é sempre menor do que o carvão Rhenish em todas as distâncias axiais, na região central.

### 5.6.5. Fração volumétrica de CO<sub>2</sub> ao longo dos raios

Os resultados da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> versus o raio são apresentados para as distâncias axiais de 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m], comparando as frações volumétricas de CO<sub>2</sub> encontradas nas simulações do carvão mineral brasileiro pulverizado CE 5200 com a do carvão Rhenish.

Nota-se na Figura 5.19 que os perfis da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> têm uma similaridade do centro do forno até o *quarl* (0,050 [m]) e coincidentemente na faixa de 0,075 [m] até a parede do forno para ambos os carvões. No centro do forno (raio 0,00 m) a diferença das frações volumétricas de CO<sub>2</sub> é 6,8% e entre os raios 0,053 [m] a 0,075 [m], a maior diferença das frações volumétricas de CO<sub>2</sub> é de 11,5%, no raio 0,063 m.

No centro do forno a fração volumétrica de CO<sub>2</sub> é de 67,7% e na parede é de 79%, para o carvão CE 5200 e para o carvão Rhenish, o valor mínimo da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> é de 60,9% e o máximo coincide com o carvão CE 5200. Nota-se na Figura 5.19 que o carvão CE 5200 tem a fração volumétrica do CO<sub>2</sub> maior ou igual que a do carvão Rhenish ao longo de todo o raio.

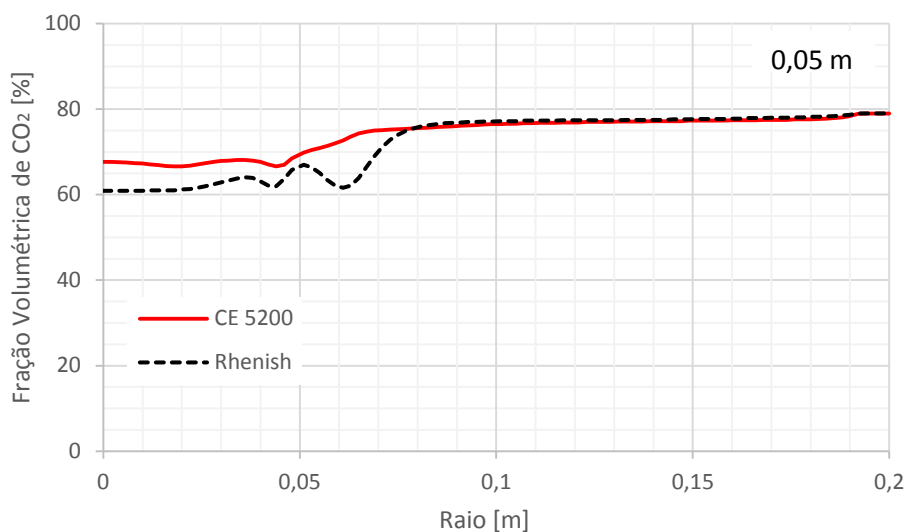


Figura 5.19 – Fração volumétrica de CO<sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador.

A Figura 5.20 mostram a fração volumétrica de CO<sub>2</sub> versus o raio na distância axial 0,2 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Observa-se na Figura 5.20 que os perfis das frações volumétricas de CO<sub>2</sub> têm valores próximos a faixa de 0,091 [m] até a parede do forno, enquanto que do centro do forno até 0,091 [m], a diferença máxima entre as frações volumétricas de CO<sub>2</sub> é de 7,7%, na posição do centro do forno.

No eixo central do forno, o valor máximo da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> do carvão CE 5200 é de 70,9% e na parede é de 78,2%. Observa-se na Figura 5.20 que a fração volumétrica de CO<sub>2</sub> é sempre maior ou igual do que a do carvão Rhenish em todo o raio.

Nota-se na Figura 5.21, o gráfico da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> versus o raio do forno para ambas as simulações dos carvões pulverizados CE 5200 e Rhenish, na distância axial 0,3 [m] do queimador. Observa-se na Figura 5.21 que os perfis da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> são muito próximos a faixa de raio entre 0,091 [m] e a parede do forno, enquanto que do centro do forno até 0,091 [m], as diferenças das frações volumétricas de CO<sub>2</sub> são no máximo de 7,7%, na posição do centro do forno.

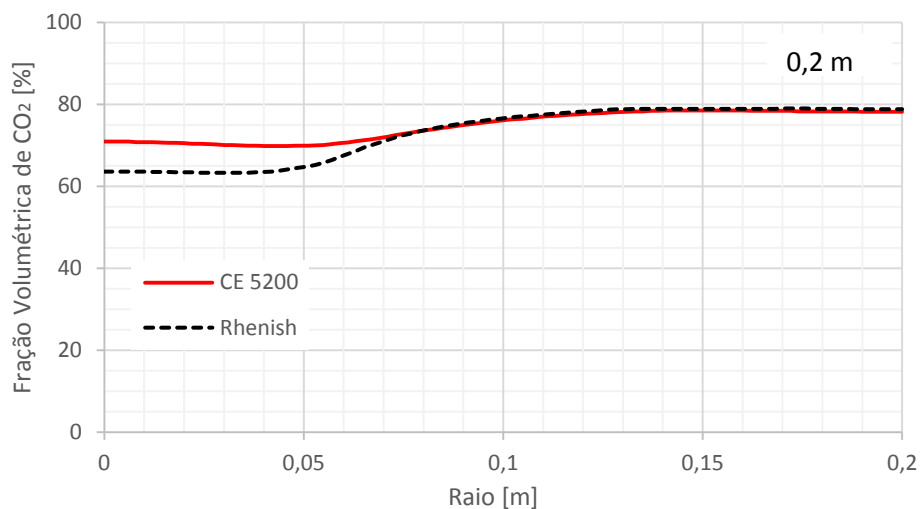


Figura 5.20 – Fração volumétrica de CO<sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador.

No eixo central do forno, o valor da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> do carvão CE 5200 é de 73,6% e na parede é de 77,7%. As frações volumétricas de CO<sub>2</sub> do carvão CE 5200 são maiores do que o carvão Rhenish no centro até o raio 0,164 m.

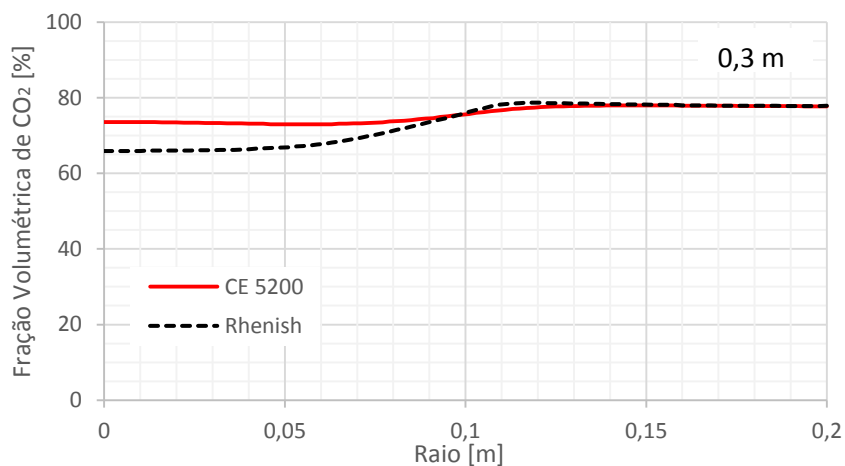


Figura 5.21 – Fração volumétrica de CO<sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador.

A Figura 5.22 mostram os perfis da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> versus raio na distância axial 0,5 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Os perfis das frações volumétricas de CO<sub>2</sub> para cada carvão pulverizado têm valores muito próximos.

Observa-se na Figura 5.22 que a maior diferença da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> é de 3%, no centro do forno.

No eixo central do forno a fração volumétrica de CO<sub>2</sub> do carvão CE 5200 é de 76,8% e na parede é de 77,0%. As frações volumétricas de CO<sub>2</sub> do carvão CE 5200 são maiores do que o carvão Rhenish.

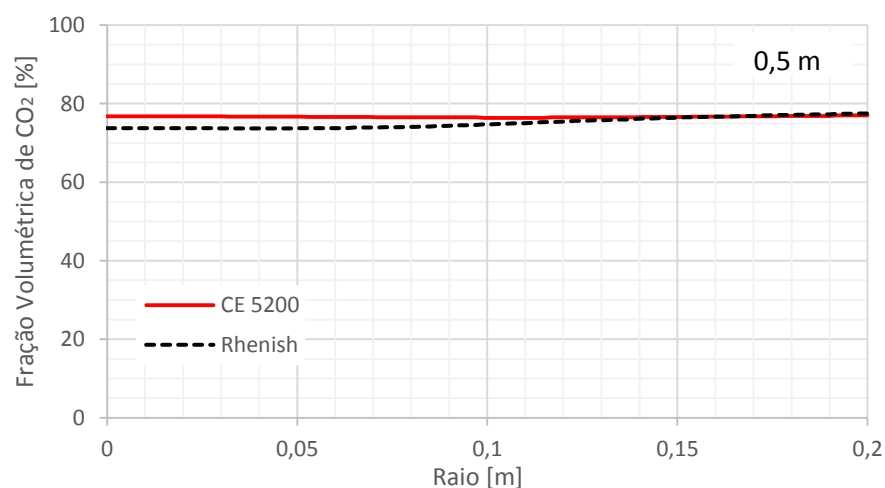


Figura 5.22 – Fração volumétrica de CO<sub>2</sub> dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador.

Da distância axial 0,05 [m] até a distância axial 0,5 [m], na região central do forno, caracterizada pela formação da chama, a quantidade de CO<sub>2</sub> varia de uma fração volumétrica de 67,7% na distância axial 0,05 [m], em seguida aumenta para 70,9%, na distância axial 0,2 [m], continua aumentando para 73,6%, na distância axial de 0,3 [m], e finalmente para 76,8%, na distância axial de 0,5 [m], para o carvão CE 5200. Isto acontece porque no início da chama o processo de combustão está começando, pouco combustível está sendo queimado e à medida que a combustão avança a quantidade de CO<sub>2</sub> aumenta, pois, a quantidade de combustível queimado é maior e o processo químico da oxidação se completa. Este fenômeno pode ser observado nas Figuras 5.19 a 5.22 em que o valor da fração volumétrica de CO<sub>2</sub> do carvão CE 5200 é sempre maior do que o carvão Rhenish em todas as distâncias axiais, na região central.

### 5.6.6. Fração volumétrica de H<sub>2</sub>O ao longo dos raios

Os resultados da fração volumétrica de H<sub>2</sub>O versus o raio são apresentados para as distâncias axiais de 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m]. Os valores das frações volumétricas de H<sub>2</sub>O são comparados com as simulações do carvão mineral brasileiro pulverizado CE 5200 e do carvão Rhenish.

A Figura 5.23 mostra o resultado das distribuições da fração volumétrica de H<sub>2</sub>O em função do raio, na distância axial de 0,05 [m] do queimador, para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish.

Nota-se na Figura 5.23, que os perfis de fração volumétrica de H<sub>2</sub>O estão próximos em duas regiões, do centro até o raio 0,024 [m] e do raio 0,079 [m] até a parede. Neste intervalo de raio, a maior diferença de fração volumétrica de H<sub>2</sub>O é de 8,5%, no raio 0,065 [m] e entre o raio 0,160 [m] e a parede, as duas curvas se coincidem.

Nota-se na Figura 5.23 que próximo ao centro do forno os valores das frações volumétricas da H<sub>2</sub>O são maiores quando comparadas com os valores da parede do forno e, que os valores das frações volumétricas de H<sub>2</sub>O para o carvão CE 5200 são inferiores aos valores do carvão Rhenish, faixa do centro até o raio 0,194 [m]. Do raio 0,194 [m] até a parede os valores da fração volumétrica de H<sub>2</sub>O, para os dois carvões, são os mesmos, sendo que na parede o valor é de 0,0%.

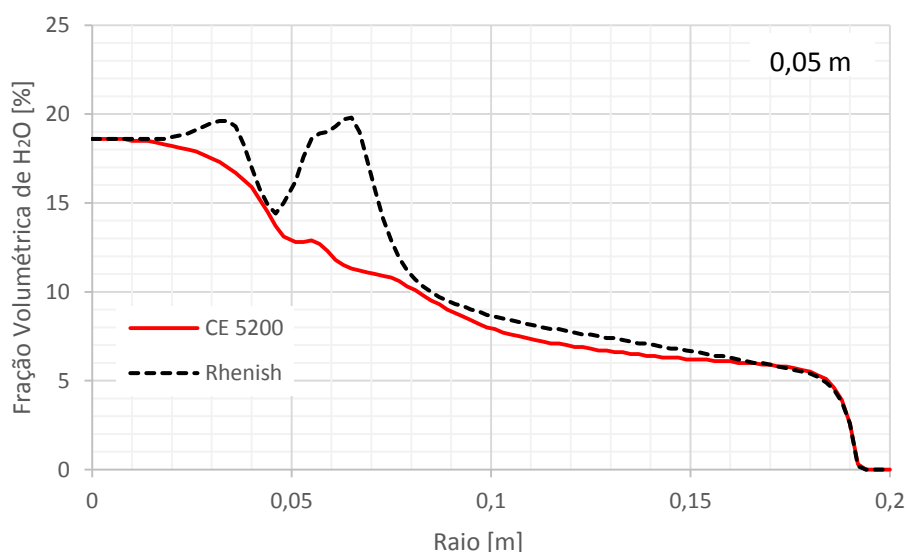


Figura 5.23 – Fração volumétrica de H<sub>2</sub>O dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,05 [m] do queimador.

A Figura 5.24 mostra o resultado da distribuição da fração volumétrica de  $H_2O$  em função do raio, na distância axial de 0,2 [m] do queimador, para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish.

Do eixo central do forno até o raio de 0,042 [m] observa-se que a diferença das frações volumétricas de  $H_2O$  é muito pequena, cerca de 0,8%, entre o carvão CE 5200 e o carvão Rhenish. Valor da fração volumétrica para o carvão CE 5200 no centro é de 19,4%.

Nota-se na Figura 5.24 que do centro do forno até o raio 0,100 [m], o carvão CE 5200 têm valores das frações volumétricas de  $H_2O$  igual ou menor que o carvão Rhenish, sendo a maior diferença de 2,4%, no raio 0,062 m. Do raio 0,100 [m] até o raio 0,182 [m], os valores das frações volumétricas de  $H_2O$  do carvão Rhenish são inferiores, atingindo uma diferença máxima, neste intervalo, de 2,4%, no raio 0,170 [m]. Do raio 0,182 [m] até a parede, os valores das frações volumétricas de  $H_2O$  do carvão CE 5200 são menores do que os valores do carvão Rhenish e o valor da fração volumétrica de  $H_2O$  na parede é de 9,4%.

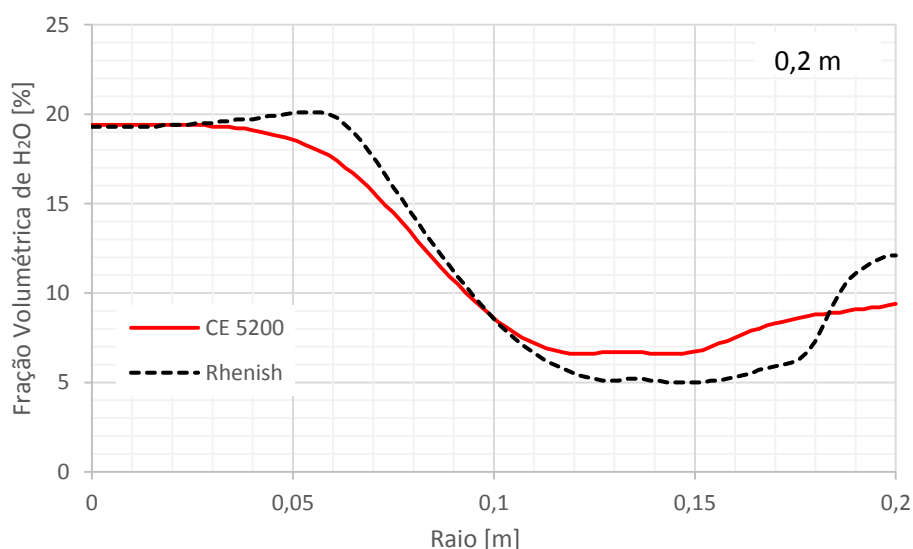


Figura 5.24 – Fração volumétrica de  $H_2O$  dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,2 [m] do queimador..

A Figura 5.25, mostra o resultado da distribuição da fração volumétrica de  $H_2O$  em função do raio, na distância axial de 0,3 [m] do queimador, para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish.

Nota-se na Figura 5.25 que os perfis de fração volumétrica de  $H_2O$  tem uma maior similaridade na faixa de 0,089 [m] até 0,129 [m], enquanto que do centro do forno até o raio 0,087 [m] e, do raio 0,131 até a parede do forno, a diferença máxima de fração volumétrica de  $H_2O$  é de 2,9%, entre os raios 0,069 [m] e 0,077 [m] e na parede do forno.

Do eixo central do forno até o raio de 0,087 [m] e no intervalo de 0,131 até a parede do forno, o valor máximo da fração volumétrica de  $H_2O$  do carvão CE 5200 de 16,8%, entre os raios 0,016 [m] e 0,046 [m], e 9,6%, na parede do forno. O valor mínimo é de 6,4% no raio 0,121 [m]. As frações volumétricas de  $H_2O$  do carvão CE 5200 são menores entre os raios 0,00 e 0,097 [m] e de 0,120 [m] até a parede do forno.

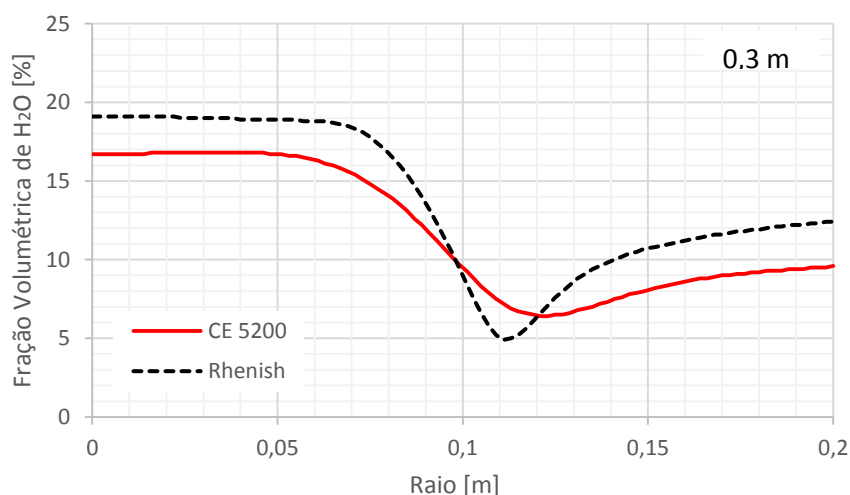


Figura 5.25 – Fração volumétrica de  $H_2O$  dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,3 [m] do queimador.

A Figura 5.26 apresenta a fração volumétrica de  $H_2O$  na distância axial 0,5 [m] do queimador para o carvão mineral pulverizado CE 5200 e Rhenish. Nota-se na Figura 5.26 que o perfil de fração volumétrica de  $H_2O$  do carvão CE 5200 têm menores valores do que o carvão Rhenish em toda a extensão do raio. O máximo valor da fração volumétrica de  $H_2O$  é 12,9% no centro do forno e o mínimo valor da fração volumétrica de  $H_2O$  é de 10,7%, na parede do forno. A máxima diferença entre os carvões CE 5200 e Rhenish é de 6,2% na região central e a menor diferença é de 3,7%, próxima a parede do forno.

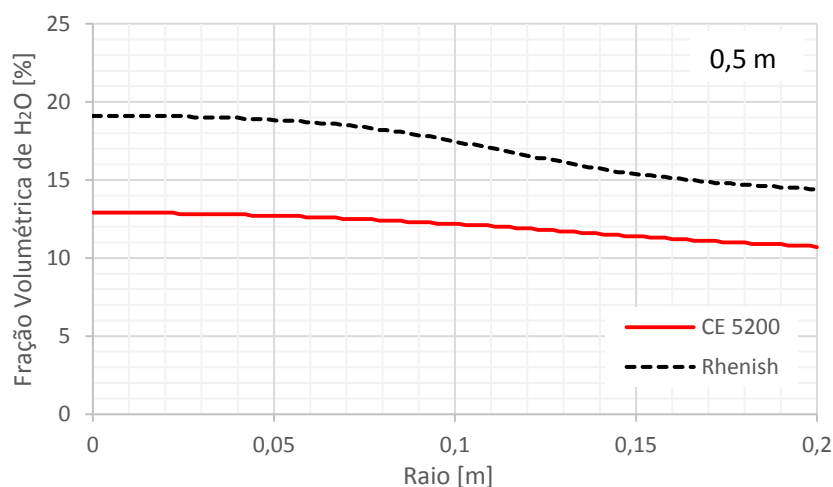


Figura 5.26 – Fração volumétrica de H<sub>2</sub>O dos carvões CE 5200 e Rhenish na distância axial 0,5 [m] do queimador.

Da distância axial 0,05 [m] até a distância axial 0,5 [m], na região central do forno, caracterizada pela formação da chama, fração volumétrica de H<sub>2</sub>O não varia de forma significativa entre as distâncias axiais 0,05 e 0,2 [m], sendo o valor cerca de 19%. Para a distâncias axial 0,3 [m] e 0,5 [m], a fração volumétrica de H<sub>2</sub>O é de 16,7% e 12,9%, respectivamente para o carvão CE 5200.

Observa-se que o carvão mineral pulverizado CE 5200, operando no forno de Aachen com as mesmas condições de contorno (tamanho da partícula, temperaturas na parede, *swirl*, teor de O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>, parâmetros pré-calculados e cinética química) apresenta semelhança nas características térmicas, aerodinâmica e química do carvão mineral Rhenish e além disso, as emissões de gases apresentaram menos CO e mais CO<sub>2</sub>.

Outro fator importante é que a temperatura de operação do carvão CE 5200 no forno é menor do que o carvão Rhenish e a temperatura está abaixo da temperatura de fusão da cinza, o que aumenta a disponibilidade da caldeira. Além disso, a temperatura da parede do forno com o carvão CE 5200 é um pouco menor que a temperatura do carvão Rhenish.

Pode-se dizer que o carvão CE 5200 pode ser usado em processo de oxi-combustão com a captura de CO<sub>2</sub> em centrais termoelétrica a carvão, pois nesta condição apresenta viabilidade técnica e ambiental.



## Capítulo 6

# CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

### 6.1. Conclusões

Foram realizadas investigações numéricas da oxi-combustão de carvão mineral nacional pulverizado para uso nas termoelétricas brasileiras, com o emprego da ferramenta computacional ANSYS CFX, visando a viabilidade técnica e ambiental desta nova tecnologia de oxi-combustão.

Os modelos de turbulência, combustão e radiação, bem como a cinética química, desvolatilização e a oxidação do *char*, para a simulação numérica, foram validados com um forno de 100 kW, da Universidade de Aachen, Alemanha.

Os resultados da validação com a simulação mostram que o escoamento dentro do combustor possui *swirl* especialmente na região de saída do queimador, próximo do *quarl*, e as diferenças do campo de velocidade entre os modelos de turbulência k- $\epsilon$  padrão e SST são devido aos métodos utilizados por cada um para o escoamento turbulento.

O perfil de velocidade axial da simulação comparado com o perfil do experimento apresenta uma boa aproximação na saída do queimador (distâncias axiais 0,025 [m] e 0,05 [m]). Na distância axial 0,2 [m] do queimador verifica-se uma discrepância entre os resultados e do experimento para ambos os modelos com diferença de até 2,61 [m/s].

O perfil de temperatura da simulação numérica para o k- $\epsilon$  padrão e o SST nas quatro distâncias axiais de medida na saída do queimador 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] diferem do perfil de temperatura do experimento nas distâncias axiais 0,05 e 0,2 [m] e aproximam-se dos dados experimentais nas distâncias axiais 0,3 [m] e 0,5 [m]. Isto se deve ao fato de que os modelos de turbulência, k- $\epsilon$  padrão e SST, não podem prever apropriadamente o comportamento da forte zona de recirculação na saída do queimador.

O perfil da fração volumétrica de O<sub>2</sub> da simulação numérica para o k- $\epsilon$  padrão e o SST nas quatro distâncias axiais do queimador 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] tem a mesma tendência do resultado experimental para os dois modelos no raio 0,05 [m]. Para as distâncias axiais 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m] o modelo SST é o que mais se aproximou dos resultados experimentais. Isto se deve ao fato de que no centro do combustor a fração de O<sub>2</sub> é baixa e na parede os resultados da fração volumétrica de O<sub>2</sub> está bem acima dos resultados experimentais. O baixo conteúdo de O<sub>2</sub> no centro do combustor é devido ao seu consumo durante o processo de combustão, o que corresponde ao perfil de temperatura.

Diante da análise dos resultados da validação dos modelos de turbulência, combustão e radiação, o modelo SST de forma global está mais próximo dos dados experimentais. Tem-se a vantagem da diferença da capacidade computacional ser significativamente pequena entre os dois modelos de turbulência, ao utilizar o *cluster*. Assim, para uma análise preliminar o modelo de turbulência SST produz resultados satisfatórios.

A comparação do resultado da simulação da velocidade axial entre os carvões mineral CE 5200 e Rhenish, com distância 0,025 [m] e 0,05 [m] do queimador, têm-se diferença nas velocidades axial, na faixa próximo ao centro do forno. Nos raios 0,3 [m] e 0,5 [m], as diferenças da velocidade axial encontram-se no raio de saída do *quarl*. Os perfis de velocidade axial têm bastante semelhança, ou seja, os carvões possuem as mesmas características aerodinâmicas.

Os resultados do perfil de temperatura, da simulação entre os dois carvões CE 5200 e Rhenish, diferem-se no centro para o raio na distância axial 0,05 [m] e também próximo do raio do *quarl* para as distâncias axiais do queimador 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m]. Os perfis de temperatura se assemelham em grande parte dos raios entre os dois carvões. O carvão CE 5200

apresenta valores de temperatura menores devido a quantidade de cinzas. Pode-se dizer que ambos os carvões possuem características térmicas semelhantes.

Com base nos resultados de temperatura, nota-se que o comportamento térmico dos dois carvões é muito próximo e, que as diferenças são decorrência do cálculo do aporte térmico, que altera as vazões e conseqüentemente as velocidades e as recirculações no interior do forno.

Os perfis de fração volumétrica de  $O_2$  e  $H_2O$  são inversamente proporcionais, porém muito semelhantes entre os carvões, existindo uma variação de fração volumétrica de  $O_2$  e  $H_2O$  com inclinações da curva menores ao longo dos raios para o carvão mineral CE 5200, ou seja, os intervalos de aumento e diminuição repentina das inclinações das curvas são menores para o carvão CE 5200 comparado ao carvão Rhenish. Isto é observado na região de saída do *quarl* para a distância axial 0,05 [m], próximo à parede do forno na distância axial 0,05 [m] e 0,2 [m], e no meio do raio para a distância axial 0,3 [m] do queimador. A maior diferença de fração volumétrica de  $O_2$  e  $H_2O$  ocorre a distância 0,5 [m] do queimador, porém a semelhança nos perfis existe. O fato de existir diferenças na fração volumétrica de  $O_2$  e  $H_2O$  principalmente, na última distância relatada, é devido a composição elementar dos carvões simulados.

Nota-se que a fração volumétrica de CO para o carvão CE 5200 é menor na faixa do centro do forno até próximo ao meio do raio. Nessa região as diferenças de fração volumétrica de CO são menores do que 6,5%. No outro intervalo, meio do raio até a parede do forno, as diferenças são pequenas, abaixo de 1,5%. Essa consideração é válida para todas as distâncias axiais ao queimador, 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m]. A emissão de poluentes CO para o ambiente, pelo carvão CE 5200 perante o carvão Rhenish, é menor.

Verifica-se que a fração volumétrica de  $CO_2$  é maior na combustão do carvão CE 5200, no centro do forno até 0,08 [m], para todas as distâncias axial do forno, 0,05 [m], 0,2 [m], 0,3 [m] e 0,5 [m]. As diferenças entre os dois carvões são menores do que a fração volumétrica de CO. Na outra faixa do raio, os dois carvões têm perfis idênticos. Uma outra comprovação é de que nesta região a oxi-combustão têm mais  $CO_2$  e menos CO na oxi-combustão do carvão CE 5200.

O carvão CE 5200 possui característica aerodinâmica e termoquímica satisfatórios em relação ao carvão Rhenish e as emissões de gases apresentam uma combustão mais completa com menos geração de CO e maior produção de  $CO_2$ . Além disso, observa-se que as fusões das cinzas não irão ocorrer no forno com o carvão nacional CE 5200, por estar a temperatura inferior 1400 [K], enquanto à temperatura de fusão do carvão é de 1818 [K]. Dessa forma, o carvão CE

5200 é um carvão com potencial a ser utilizado na geração termoelétrica, apresentando uma possível viabilidade térmica e ambiental.

## 6.2. Sugestões de Trabalhos Futuros

Temas que podem ser desenvolvidos futuramente com base no presente trabalho:

- 1) Realizar um experimento melhor controlado em escala laboratorial com o carvão mineral CE 5200 de modo que possa validar a modelagem.
- 2) Melhorar o modelo de radiação empregando o WSSG, de modo a obter resultados mais próximos do experimento validado.
- 3) Realizar a simulação de ar/combustível (Combustão convencional) na entrada do forno de Aachen, utilizando o carvão mineral CE 5200, para que se analise as vantagens e desvantagens que a oxi-combustão proporciona.
- 4) Realizar a simulação numérica para outros tipos de carvões minerais brasileiros utilizando a oxi-combustão com a modelagem apresentada na tese.
- 5) Investigar a cinética química dos carvões nacionais para que assim possam ser implementados na modelagem criada de forma a obter resultados mais próximos dos valores experimentais obtidos em escala laboratorial.
- 6) Alterar a geometria do queimador para que as características aerodinâmicas se assemelhem aos resultados do carvão mineral CE 5200 e se aproximem dos resultados do carvão mineral Rhenish, decorrente do aporte térmico.
- 7) Realizar nas simulações numéricas considerando o tempo de residência de cada carvão mineral.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICA

- AL-ABBAS, A. H.; NASER, J.; DODDS, D. CFD modelling of air-fired and oxy-fuel combustion of lignite in a 100 kW furnace, **Fuel**, vol. 90, p. 1778-1795, 2011.
- ALLAM, R.J. Improved oxygen production technologies, **Energy Procedia**, vol. 1, p. 461–470, 2009.
- ANAPOLSKI, J. L. P. **Modelagem Numérica do Escoamento Reativo com Rotação em uma Fornalha Cilíndrica**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 2015.
- ANDERSSON, K.; JOHNSON, F. Process evaluation of an 865 MWe lignite fired O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> power plant, **Energy Conversion and Management**, vol. 47, p. 3487–3498, 2006
- ANEEL. Agência Nacional de Energia Elétrica. **Atlas de Energia Elétrica do Brasil**. Parte III – Fontes não-renováveis. 2008
- ANHEDEN, M.; YAN, J.; SMEDT, G. D. Denitrogenation (or oxy-fuel concepts), **Oil Gas Science and Technology**, vol. 60, p. 485–495, 2005.
- ANSYS INC. CFX Solver Theory Manual. **Oxfordshire: CFX v. ANSYS COMP**, 2013.
- BERGEL, A. Simulação numérica de câmaras de combustão para tratamento térmico de metais. XIV Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica, p. 1–10, 2007.
- BURDYNY, T.; STRUCHTRUP, H. Hybrid membrane/cryogenic separation of oxygen from air for use in the oxy-fuel process, **Energy**, vol. 35, p. 1884-1897, 2010.
- CANO, T. M. Mineração de Energia – Carvão. In: Rodrigues, A. F. S.; Ferraz, C. P. (Org.) **Economia Mineral do Brasil**. Brasília: Cidade Grafica e Editora Ltda, 2009, p. 51-69.
- CAVALCANTI, D. E. S. **Estudo Fluidodinâmico Computacional de um Forno Piloto Rotativo Contínuo a Gás Natural para Produção de Gesso Beta**. Universidade Federal de pernambuco, 2013.
- CHEN, LEI. **Computational Fluid Dynamics Simulations of Oxy-Coal Combustion for Carbon Capture at Atmosphere and Elevated Pressures**, Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering at the Massachusetts Institute of Technology, 2013.
- CHEN, L.; YONG, S. Z.; GHONIEM, A. F. Oxy-fuel combustion of pulverized coal: Characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 38, p. 156-214, 2012.
- CHUI, E.H.; HUGHES, P.M.J. Validation of NO<sub>x</sub> and NO<sub>x</sub> precursor predictions in coal flames, **Combust Sci Technol**, vol. 119, p. 51–75, 1996.

CHUI, E. H.; DOUGLAS, M. A.; TAN, Y. Modeling of Oxi-fuel combustion for a western Canadian sub-bituminous coal, **Fuel**, vol. 82, p. 1201-1210, 2003.

CHUI, E. H.; MAJESKI, A. J.; DOUGLAS, M. A.; TAN, Y.; THAMBIMUTHU, K. V. Numerical investigation of oxy-coal combustion to evaluate burner and combustor design concepts, **Energy**, vol. 29, p. 1285-1296, 2004.

FINKENRATH, M. Cost and Performance of Carbon Dioxide Capture from Power Generation, **International Energy Agency**, 2011.

CZAKIERT, T.; SZTEKLER, K.; KARSKI, S.; MARKIEWICZ; NOWAK, W. Oxy-fuel circulating fluidized bed combustion in a small pilot-scale test rig, **Fuel Processing Technology**, vol. 91, p. 1617-1623, 2010.

DA SILVA, C. V.; INDRUSIAK, M. L. S.; BESKOW, A. B. CFD Analysis of the Pulverized Coal Combustion Processes in a 160 MWe Tangentially-Fired-Boiler of a Thermal Power Plant, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, vol. 32, p. 427-436, 2010.

DA SILVA, C. V.; ZIEMNICZAK, A. LAZZARI, L. G.; BESKOW, A. B.; INDRUSIAK, M. L. S.; SCHNEIDER, P. S. CFD analysis of the coal combustion in a boiler of a thermal power plant using the oxyfuel processes, **COBEM 2011**, October 24-28, Natal-RN, Brazil, 2011

DAMEN, K.; TROOST, M.; FAAIJ, A.; TURKENBURG, W. A comparison of electricity and hydrogen production systems with CO<sub>2</sub> capture and storage. Part A: Review and selection of promising conversion and capture technologies, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 32, p. 215–246, 2006.

DARDE, A.; PRABHAKAR, R.; TRANIER, J.-P.; PERRIN, N. Air separation and flue gas compression and purification units for oxy-coal combustion systems, **Energy Procedia**, vol. 1, p. 527–534, 2009.

DAVISON, J. Performance and costs of power plants with capture and storage of CO<sub>2</sub>, **Energy**, vol. 32, p. 1163-1176, 2007.

DEPARTAMENTO NACIONAL DE PRODUÇÃO MINERAL. Disponível em: <http://www.dnpm.gov.br>. Acesso em: 14/11/2008

DEON, D. L. **Estudo Numérico de Chamas Turbulentas Não Pré-Misturadas Através de Modelos Baseados no Conceito de Flamelets**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 2016.

DE SOUZA, J. F. A.; DE OLIVEIRA, L. R.; DE AZEVEDO, J. L. L.; SOARES, I. D.; MATA, M. M. Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. **Revista Brasileira de Geofísica**, vol. 29, p. 21–41, 2011.

DUAN, L. B.; ZHAO, C. S.; ZHOU, W.; QU, C. R.; CHEN, X. P. O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> coal combustion characteristics in a 50 kW<sub>th</sub> circulating fluidized bed, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 5, pp. 770-776, 2011.

DUAN, L.; SUN, H.; ZHAO, C.; ZHOU, W.; CHEN, X. Coal combustion characteristics on an oxy-fuel circulating fluidized bed combustor with warm flue gas recycle, **Fuel**, vol. 127, p. 47-51, 2014.

EDGE, P.; GUBBA, S. R.; MA, L.; PORTER, R.; POURKASHANIAN, M.; WILLIAMS, A. LES modelling of air and oxy-fuel pulverized coal combustion – impact on flame properties, **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 33, p. 2709-2716, 2011a.

EDGE, P.; GHAREBAGHI, M.; IRONS, R.; PORTER, R.; PORTER, R. T. J.; POURKASHANIAN, M.; SMITH, D.; STEPHENSON, P.; WILLIAMS, A. Combustion modelling opportunities and challenges for oxy-coal carbon capture technology. **Chemical Engineering Research and Design**, vol. 89, n. 9, p. 1470–1493, 2011b.

FIELD, M.A. Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1200 K and 2000 K, **Combustion and Flame**, vol. 13, p. 237–252, 1969.

GHONIEM, A. F. Needs, resources and climate change: Clean and efficient conversion technologies, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 37, p. 15-51, 2011.

GIBBINS, J.; CHALMERS, H. Carbon capture and storage, **Energy Policy**, vol. 36, p. 4317–4322, 2008.

GLOBAL CCS INSTITUTE. Economic Assessment of Carbon Capture and Storage Technologies: 2011 Update. p. 60, 2011.

HADJIPASCHALIS, I.; KOURTIS, G.; POULLIKKAS, A. Assessment of oxyfuel power generation technologies, **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, vol. 13, p. 2637–2644, 2009.

HAMMOND, G. P.; ONDO AKWE, S. S.; WILLIAMS, S. Techno-economic appraisal of fossil-fuelled power generation systems with carbon dioxide capture and storage, **Energy**, vol. 36, p. 975-984, 2011.

HIGGINBOTHAM, P.; WHITE, V.; FOGASH, K.; GUVELIOGLU, G. Oxygen supply for oxyfuel CO<sub>2</sub> capture, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 5, p. S194–S203, 2011.

HOWARD J. B., WILLIAMS G. C., FINE D. H., Kinetics of carbon monoxide oxidation in postflame gases, Symposium (International) on Combustion, vol. 14, p. 975–986, 1973.

HU, Y.; YAN, J. Numerical simulation of radiation intensity of oxy-coal combustion with flue gas recirculation, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 17, p. 473-480, 2013.

IEA. Estimating future trends in the cost of CO<sub>2</sub> capture technologies, International Energy Agency. n. February, p. 104, 2006.

JOÃO, J. J.; SKORONSKI, E.; MACHADO, D. B.; RIBEIRO, J. M.; COSTA, F. S. Estudo da Correlação Entre a Temperatura de Fusão e Composição Química das Cinzas Gerada em Usina Termelétrica no Sul do Brasil, **Revista Virtual de Química**, Vol. 9 (2), 2017

KANGWANPONGPAN, T. **Contribution to CFD Modeling of Lignite Oxy-fuel Combustion with Special Focus on Radiation Properties**, Doctor of Philosophy at Brandenburg University, Cottbus, Germany, 2013.

KANGWANPONGPAN, T; SILVA, R. C.; KRAUTZ, H. J. Prediction of oxy-coal combustion through an optimized weighted sum of gray gases model. **Energy**, vol. 41, n. 1, p. 244–251, 2012.

KAKARAS, E.; DOUKELIS, A.; GIANNAKOPOULOS, D.; KOUMANAKOS, A. Economic implications of oxy-fuel application in a lignite-fired power plant, **Fuel**, vol. 86, p. 2151-2158, 2007.

KATZER, J.; ANSOLABEHERE, S.; BEER, J.; DEUTCH, J.; ELLERMAN, A. D.; FRIEDMANN, S. J.; STEINFELD, E. The Future of Coal: options for a carbon-constrained world. Massachusetts Institute of Technology, MA, USA, p. 176, 2007.

KRZYWAŃSKI, J.; CZAKIERT, T.; MUSKAŁA, W.; NOWAK, W. Modelling of CO<sub>2</sub>, CO, SO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> and NO<sub>x</sub> emission from the oxy-fuel combustion in circulating fluidized bed, **Fuel Processing Technology**, vol. 92, p. 590-596, 2011.

KURAMOCHI, T.; RAMÍREZ, A.; TURKENBURG, W.; FAAIJ, A. Comparative assessment of CO<sub>2</sub> capture technologies for carbon-intensive industrial processes, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 38, p. 87-112, 2012.

LI, W.; LI, S.; REN, Q.; TAN, L.; LI, H.; LIU, J.; LU, Q. Study of oxy-fuel coal combustion in a 0,1 MW<sub>th</sub> circulating fluidized bed at high oxygen concentrations, **Energy & Fuels**, vol. 28, p. 1249-1254, 2014.

LIU, H; ZAILANI, R; GIBBS, B. M. Comparison of pulverized coal combustion in air and in mixtures of O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>, **Fuel**, vol.84, p.833-840, 2005.

MANCINI, N. D.; MITSOS, A. Ion transport membrane reactors for oxy-combustion - Part I: intermediate-fidelity modeling, **Energy**, vol. 36, p. 4701-4720, 2011a.

MANCINI, N. D.; MITSOS, A. Ion transport membrane reactors for oxy-combustion - Part II: Analysis and comparison of alternatives, **Energy**, vol. 36, p. 4721-4739, 2011b.

MARCHI, C. H. **Verificação e estimação do erro de discretização em CFD**. Universidade Federal do Paraná (UFPR), p. 1-13, Agosto, 2007.

MAYERS, A. M. The rate of reduction of carbon dioxide by graphite, **Journal of the**



**American Chemical Society**, vol. 56, p. 70-76, 1934a.

MAYERS, A. M. The rate of reduction of graphite by steam. **Journal of the American Chemical Society**, vol. 56, p. 1879-1881, 1934b.

MEI, C.; ZHOU, J.; PENG, X.; ZHOU, N.; ZHOU, P. **Simulation and Optimization of Furnaces and Kilns for Nonferrous Metallurgical Engineering**. Springer, p. 450, 2010.

METZ, B., DAVIDSON, O.; DE CONINCK, H. C.; LOOS, M.; MEYER, L. A. (eds.), IPCC, 2005: IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage. Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.

MIKULKA, J.; K<sup>ˇ</sup>R<sup>ˇ</sup>T<sup>ˇ</sup>Z, T.; KROUTILOVA, E.; FIALA, P. Numerical Modeling of Light Sources with R-FEM Method in CFX Environment., **Progress In Electromagnetics Research Symposium Proceedings**, p. 424-427, 2010, 2010.

MOULLEC, Y. L. Assessment of carbon capture thermodynamic limitation on coal-fired power plant efficiency, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 7, p. 192-201, 2012.

NORMANN, F.; ANDERSSON, K.; LECKNER, B.; JOHANSSON, F. Emission control of nitrogen oxides in the oxy-fuel process, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 35, p. 385-397, 2009.

OLAJIRE, A. A. CO<sub>2</sub> capture and separation technologies for end-of-pipe applications – A review, **Energy**, vol. 35 (6), p. 2610-2628, 2010.

PINHEIRO JÚNIOR, J. L. **Estudo Numérico de uma Câmara de Combustão de Microturbina a Gás de Baixa Emissão de Poluentes**. Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, Brasília, Brasil, 2010. 122 p.

PIRES, J. C. M.; MARTINS, F. G.; ALVIM-FERRAZ, M. C. M.; SIMÕES M. Recent developments on carbon capture and storage: An overview, **Chemical Engineering Research and Design**, vol. 89 (9), p. 1446-1460, 2011.

RAPOSO, G. M. **Simulação Numérica do Escoamento em Hidrociclone Destinado a Aplicações de Alto Teor de Óleo**. Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, 2008. 103 p.

REZENDE, A. L. T. **Análise Numérica da Bolha de Separação do Escoamento Turbulento sobre Placa Inclinada**. Tese de Doutorado, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, 2009. 262 p.

RONCHETTI, B. **Simulação Numérica da Combustão de Metano em Câmara Cilíndrica Utilizando o CFX 10.0**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 2008. 190 p.

ROY, B.; BHATTACHARYA, S. Oxy-fuel fluidized bed combustion using Victorian brown coal: an experimental investigation, **Fuel Processing Technology**, vol. 117, p. 23-29, 2014.

RUBIN, E. S.; YEH, S.; ANTES, M.; BERKENPAS, M.; DAVISON, J. Use of experience curves to estimate the future cost of power plants with CO<sub>2</sub> capture, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 1, p. 188-197, 2007.

RÜCKERT F. U., SABEL T., SCHNELL U., HEIN [K]. R. G., RISIO B. Comparison of different global reaction mechanisms for coal-fired utility boilers, Progress in Computational Fluid Dynamics, **An International Journal (PCFD)**, Vol. 3 (2/3/4), p.130-139, 2003.

SHAW D. W., ZHU X., MISRA M. K., ESSENHIGH R. H., Determination of global kinetics of coal volatiles combustion, **Symposium (International) on Combustion**, vol. 23, p. 1155-1162, 1991.

SICORSKI, R. S. **Modelagem Numérica Aplicada aos Fenômenos de Escoamento e Mistura em Modelos Físicos de Painéis de Aciaria**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 2006. 66 p.

SIERRA, J. E. G. **Modelagem Numérica Bidimensional de Combustão de Partículas de Carvão em Atmosferas de O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>**. Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, Brasília, Brasil, 2013. 117 p.

SILVA, I. C. **Otimização de Superfícies Aletadas em Tubos da Seção de Radiação de Fornos Sujos a Chama**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2015. 108 p.

SINGH, B.; STRØMMAN, A. H.; HERTWICH, E. G. Comparative life cycle environmental assessment of CCS technologies, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 5 (4), p. 911-921, 2011.

SINGH, D.; CROISSET, E; DOUGLAS, P. L.; DOUGLAS, M. A. Techno-economic study of CO<sub>2</sub> capture from an existing coal-fired power plant: MEA scrubbing vs. O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> recycle combustion, **Energy Conversion and Management**, vol. 44 (19), p. 3073–3091, 2003.

STEENEVELDT, R.; BERGER, B.; TORP, T. A. CO<sub>2</sub> Capture and Storage: Closing the Knowing–Doing Gap, **Chemical Engineering Research and Design**, vol. 84 (9), p. 739-763, 2006.

STRUBE, R.; MANFRIDA, G.; CO<sub>2</sub> capture in coal-fired power plants - Impact on plant performance, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, vol. 5 (4), p. 710–726, 2011.

SUNDSTRON, M. G. **Caracterização e Avaliação das Cinzas da Combustão de Carvão Mineral Geradas na Região do Baixo Jacuí-RS**. Dissertação de Mestrado, Centro Universitário La Salle, Canoas, 2012. 121 p.

TAN, Y.; CROISSET, E.; DOUGLAS, M. A.; THAMBIMUTHU, K.V. Combustion characteristics of coal in a mixture of oxygen and recycled flue gas, **Fuel**, vol.85, p. 507-512, 2006.

TOFTEGAARD, M. B.; BRIX, J.; JENSEN, P. A.; GLARBORG, P.; JENSEN A. D. Oxy-fuel combustion of solid fuels, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 36 (5), p. 581-625, 2010.

TOPOROV, D.; BOCIAN, P.; HEIL, P.; KELLERMANN, A.; STADLER, H.; TSCHUNKO, S.; FÖRSTER, M.; KNEER, R. Detailed Investigation of a Pulverized Fuel Swirl Flame in CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Atmosphere. **Combustion and Flame**, vol. 155, p. 605–18, 2008.

WALL T.F. Combustion processes for carbon capture, **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 31, p. 31–47, 2007.

WALL, T.; LIU, Y; SPERO, C.; ELLIOTT, L.; KHARE, S.; RATHNAM, R.; ZEENATHAL, F.; MOGHTADERI, B.; BUHRE, B.; SHENG, C.; GUPTA, R.; YAMADA, T.; MAKINO, K.; YU, J. An Overview on Oxyfuel Coal Combustion – State of the Art Research and Technology Development, **Chemical Engineering Research and Design**, vol. 87, p. 1003-1016, 2009.

WARZECHA, P.; BOGUSLAWSKI, A. LES and RANS modeling of pulverized coal combustion in swirl burner for air and oxy-combustion technologies, **Energy**, vol. 66, p. 732-743, 2014a.

WARZECHA, P.; BOGUSLAWSKI, A. Simulations of pulverized coal oxy-combustion in swirl burner using RANS and LES methods”. **Fuel Processing Technology**, vol. 119, p. 130-135, 2014b.

XIONG, J.; ZHAO, H.; ZHENG, C.; LIU, Z.; ZENG, L.; LIU, H.; QIU, J. An Economic feasibility study of O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> recycle combustion technology based on existing coal-fired power plants in China, **Fuel**, vol. 88, p. 1135-1142, 2009.

ZHANG, J.; PRATIONO, W.; ZHANG, L.; ZHANG, Z. Computational fluid dynamics modeling on the air-firing and oxy-fuel combustion of dried Victorian Brown Coal, **Energy & Fuel**, vol. 27, p. 4258-4269, 2013.

ZHENG, C; LIU, Z. Oxy-fuel Combustion: Fundamentals, Theory and Practice. **Academic Press**, p. 384, 2017.

ZHOU, W.; ZHAO, C.; DUAN, L.; CHEN, X.; LIU, D. A simulation study of coal combustion under O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>/RFG atmospheres in circulating fluidized bed, **Chemical Engineering Journal**, vol. 223, p. 816-823, 2013.

ZIMONT V. L., TRUSHIN Y. M., Total combustion kinetics of hydrocarbon fuels, **Combustion Explosion and Shock Waves**, vol. 5, p. 391-394, 1969.