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

TESE DE DOUTORADO

Estudo Numérico da Termo-Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbinas a Gás: Aplicação ao caso de Micro Turbinas

Autor: **Harley Souza Alencar**
Orientador: **Prof. Dr. Marco Antonio Rosa do Nascimento**
Co-orientador: **Prof. Dr. Hélcio Francisco Villa Nova**

Itajubá
Estado de Minas Gerais
Março de 2007

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

TESE DE DOUTORADO

Estudo Numérico da Termo-Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbinas a Gás: Aplicação ao caso de Micro Turbinas

Autor: **Harley Souza Alencar**
Orientador: **Prof. Dr. Marco Antonio Rosa do Nascimento**
Co-orientador: **Prof. Dr. Hélcio Francisco Villa Nova**

Curso: **Doutorado em Engenharia Mecânica**
Área de Concentração: **Conversão de Energia**

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

Itajubá
Estado de Minas Gerais
Março de 2007

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá –
Bibliotecária Margareth Ribeiro- CRB_6/1700

A368e

Alencar, Harley Souza
Estudo numérico da termo-aerodinâmica de câmaras de combustão para turbinas a gás : aplicação ao caso das micro_ turbinas / Harley Souza Alencar. -- Itajubá,(MG) : UNIFEI, 2006.
151 p. : il.

Orientador : Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento.
Co-orientador : Prof. Dr. Hélcio Francisco Villa Nova.
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Itajubá.

1. Microturbinas a gás. 2. Câmaras de combustão. 3. Dinâ_ mica de fluído computacional. 4. Centrais termelétricas. I. Nas_ cimento, Marco Antônio Rosa do, orient. II. Villa Nova, Hélcio Francisco, co-orient. III. Universidade Federal de Itajubá. IV. Título.

CDU 621.438(043)

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

TESE DE DOUTORADO

Estudo Numérico da Termo-Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbinas a Gás: Aplicação ao caso de Micro Turbinas

Autor: **Harley Souza Alencar**
Orientador: **Prof. Dr. Marco Antonio Rosa do Nascimento**
Co-orientador: **Prof. Dr. Hélcio Francisco Villa Nova**

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. José Nivaldo Hinckel - INPE
Prof. Dr. Pedro Teixera Lacava – ITA
Prof. Dr. Genésio José Menon – UNIFEI
Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora – UNIFEI
Prof. Dr. Ricardo Dias Martins de Carvalho, Presidente – UNIFEI

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus pais Raimundo Alencar e Cremilda Souza Alencar, aos meus filhos Maria Sofia Pádua Alencar e Rafael Pádua Alencar, e à memória de minha querida avó Olindina Côrrea de Souza.

Agradecimentos

Agradeço a todos aqueles que se dispuseram em me ajudar para desenvolver este trabalho, em especial aos professores,

Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento – IEM - NEST,
Prof. Dr. Hélcio Francisco Villa Nova,
Prof. Dr. Genésio José Menon do IEM,
Prof. Dr. José Leonardo Noronha do IEPG,
Prof. Dr. Luiz Fernando Barca do IEM, e
Prof. Dr. José Juliano de Lima Júnior do IEM.

À empresa ALSTOM de Taubaté, São Paulo, que me incentivou e deu todo o apoio necessário para iniciar este trabalho em Dinâmica de Fluido Computacional (CFD),
Ao Engenheiro Lourival Jorge Mendes Neto, cujo Mestrado defendido na UNIFEI em 2003 inspirou esta Tese,
À Engenheira Lucilene de Oliveira Rodrigues - NEST, pelo apoio no decorrer do trabalho de cálculo, bem como aos demais colaboradores do NEST,
E, finalmente, aos funcionários da UNIFEI, sobretudo à Janice Duarte Viana do NEST, Cristina Silva da PRPPG e Regina Aparecida Salomon Storino do DRA

“O pensamento é a grandeza do homem.”
Blaise Pascal (1623-1662)

Resumo

ALENCAR, H. S. (2007), *Estudo Numérico da Termo Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbinas a Gás: Aplicação ao caso das Micro Turbinas*, Itajubá, 151p. Tese (Doutorado em Ciências de Engenharia Mecânica) - Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Este trabalho estuda o comportamento de uma câmara de combustão para uma micro turbina a gás na condição nominal e em regime permanente. Para isso, é desenvolvida uma metodologia que aplica a Dinâmica de Fluido Computacional com a função de determinar a distribuição de pressão, velocidade e temperatura, os quais são úteis para entender o comportamento termo aerodinâmico da chama e sua influência para o projeto da câmara de combustão.

A câmara de combustão adotada é do tipo Anular. Foi projetada para operar com diesel e/ou querosene. Este equipamento aciona uma microturbina a gás da Solar Turbines com potência igual a 50 [kW], a qual está instalada no Laboratório de Sistemas Térmicos do NEST-UNIFEI.

Devido ao fato deste equipamento poder apresentar escoamento turbulento e chamas híbridas (pré-misturadas ou não pré-misturadas), diferentes aproximações matemáticas são testadas para simular seu escoamento e seu processo de combustão. O fluido adotado é o gás natural, o qual é padrão para muitas pesquisas sobre combustão, uma vez que seu mecanismo de reação é bem conhecido e apresenta baixas emissões de poluentes.

Os modelos de escoamentos turbulentos testados são k-ε, RNG k-ε e SST. Os modelos de combustão testados são *Eddy Dissipation Model* (EDM) e *Laminar Flamelet Model* (LFM). Os modelos de transferência de calor por radiação testados são *Discrete Transfer Model* e *P1 Model*. São realizados também estudos de validação destes modelos a fim de identificar os modelos mais precisos. O Software comercial adotado é ANSYS CFX v5.7®.

A reação química do gás natiral adota reação com duas etapas para o metano e o etano, porque representam sua principal composição química. A reação química da combustão é simulada pelo software GASEQ®, o qual é útil para determinar a concentração das emissões. As características termodinâmicas nas entradas e saídas dos componentes do ciclo térmico da micro turbina a gás são simuladas pelo software GateCycle® da GE.

Desta forma, este trabalho permite também apresentar uma análise inicial para avaliar as potenciais modificações no projeto original para a câmaras de combustão, quando operam com diferentes combustíveis e seus efeitos no comportamento termo aerodinâmico da chama.

Palavras-chave: Micro Turbinas a Gás, Câmara de Combustão, CFD e Centrais Termelétricas.

Abstract

ALENCAR, H. S. (2007), Numerical *Study about Thermal Aerodynamic of Combustion Chambers for Gas Turbines: Application to Small Gas Turbines*, Itajubá, 151p. Thesys (Doctor in Sciences of Mechanical Engineering) –Mechanical Engineering Institute, Federal University of Itajubá.

This work studies the behavior of a combustion chamber for a small gas turbine in nominal condition and steady state. For it, it is developed a methodology that uses Computational Fluid Dynamic with the function to set the distribution of pressure, velocity and temperature, which are useful to understand the thermo aerodynamic behavior of flame and its influence for the design of combustion chamber.

The adopted combustion chamber is the type Annular. It was deseigned to work with the fuels diesel and/or kerosene. This equipment drives a microturbirne from Solar Turbines with power equal to 50 [kW], which is installed in the Thermal Sciences Laboratory at NEST-UNIFEI.

Due to this equipment can have turbulent flow and hybrid flames (premixed and non-premixed), different mathematical approx are tested to simulate its flow and its combustion process. The adopted fluid is the natural gas, which it is standard to many researches about combustion, once that its reaction mechanism is well known and has low emission.of pollutants.

The tested turbulence models are k-ε, RNG k-ε e SST. The tested combustion models are: Eddy Dissipation Model (EDM) and Laminar Flamelet Model (LFM). The Radiation is simulated by Discrete Transfer Model and P1 Model. It is realized a validation work to identify the models with more precision. The commercial software adopted is ANSYS CFX v5.7®.

The chemical reaction for the natural gas adopts reaction with two steps for methane and ethane, because represent its main chemical composition. The chemical reaction is made by software GASEQ®, which is useful to determine the concentrations of emissions. The thermodynamic characteristics in inlets and outlets from equipments of cycle to know the parameters for combustion chamber are calculated by software GateCycle® from GE.

From this, this work permits to present too an initial analysis to evaluate the potential modifications in the original design for combustion chambers, when operate with different fuels and its effects in thermal aerodynamic behavior of flame.

Keywords: Small Gas Turbines, Combustion Chamber, CFD and Thermal Electric Power Plants.

Sumário

DEDICATÓRIA V

AGRADECIMENTOS VI

RESUMO VIII

SUMÁRIO I

LISTA DE FIGURAS V

LISTA DE TABELAS XII

SIMBOLOGIA XIII

LETRAS LATINAS XIII

LETRAS GREGAS XVIII

SUBSCRITOS XXI

SIGLAS XXII

CAPÍTULO 1 1

INTRODUÇÃO 1

1.1 Aspectos Gerais ---- 1

1.2 Objetivo do Trabalho ---- 7

1.3 Justificativas do Trabalho ---- 7

1.4 Contéudo do Trabalho ---- 8

1.5 Revisão Bibliográfica ---- 10

CAPÍTULO 2 21

MICRO TURBINAS A GÁS 21

2.1 Cronologia ---- 22

2.2 Caracterização Operacional ---- 23

2.2.1 Principais Fabricantes ---- 26

2.2.2 Aplicações ---- 28

2.2.3 Características Construtivas Principais ---- 31

2.2.4 Comparação com Outras Tecnologias de Geração Elétrica ---- 34

2.3 Câmaras de Combustão ---- 36

2.3.1 Combustíveis para Micro Turbinas a Gás ---- 39

2.3.2 Funcionamento de Câmara de Combustão Testada ---- 40

2.4 Caracterização da Combustão ---- 43

2.5 Caracterização da Transferência de Calor ----------48
2.6 Caracterização das Emissões ----------50
2.7 Pespectivas Tecnologicas ----------54
CAPÍTULO 3 58
A DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL APLICADA ÀS CÂMARAS DE COMBUSTÃO 58
3.1 Generalidades ----------58
3.1.1 Processo de Modelagem e Simulação ----------58
3.1.2 Dinâmica de Fluido Computacional ----------60
3.2 Equacionamento do Problema Físico ----------62
3.2.1 Equações de Transporte das Espécies, Quantidade de Movimento e Energia para a Combustão utilizadas pelo CFX ----------62
3.3 Simulação do Problema Físico ----------65
3.3.1 Modelos de Escoamentos Turbulentos ----------65
3.3.2 Modelos de Combustão ----------70
3.3.3 Modelos de Radiação ----------78
3.3.4 Modelos de Variação da Energia no Sistema ----------84
3.3.5 Condições de Convergência ----------84
CAPÍTULO 4 86
MODELAGEM DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO 86
4.1 Descrição da Metodologia ----------86
4.2 Descrição do Modelo da Micro Turbina a Gás Testada ----------88
4.3 Cálculo Termodinâmico do Ciclo da Micro Turbina a Gás Testada ----------91
4.4 Cálculo Termo Químico da Mistura Combustível e Oxidante ----------93
4.5 Modelagem da Câmara de Combustão ----------94
4.5.1 Modelo Geométrico ----------94
4.5.2 Geração da Malha ----------96
4.5.3 Estabelecimento das Condições de Contorno Iniciais ----------97
4.5.4 Especificação do Modelo de Escoamento ---------- 100
4.5.5 Especificação do Modelo de Combustão ---------- 102
4.5.6 Especificação do Modelo de Variação da Energia ---------- 105
4.5.7 Especificação do Modelo de Radiação ---------- 106
4.5.8 Especificação das Condições de Convergência ---------- 106
CAPÍTULO 5 108

ANALÍSE DOS RESULTADOS **108**

5.1 Validação do CFD ---- 108

5.1.1 Validação Aerodinâmica ---- 108

5.1.2 Validação Termo Aerodinâmica ---- 115

5.2 Resultados sobre o Estudo Aerodinâmico da Câmara de Combustão Testada ---- 117

5.3 Resultados sobre o Estudo Termo Aerodinâmico da Câmara de Combustão Testada 123

5.3.1 Resultados para os Modelos de Combustão EDM e FM utilizando Gás Metano 124

5.3.2 Resultados para o Modelo de Combustão FM utilizando Gás Natural---- 127

5.3.3 Resultados para o Modelo de Combustão EDM utilizando Gás Natural ---- 131

5.3.4 Comparação entre os Modelos de Combustão Testados utilizando Gás Natural 134

5.4 Propostas para Adequação do Projeto da Câmara de Combustão Testada para Gás Natural ---- 139

CAPÍTULO 6 **141**

CONCLUSÕES, CONTRIBUIÇÕES E RECOMENDAÇÕES **141**

6.1 Conclusões---- 141

6.2 Contribuições---- 142

6.3 Recomendações ---- 143

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS **144**

APÊNDICE A **152**

FOTOS DO EQUIPAMENTO MODELADO **152**

A.1 Micro Turbina a Gás---- 152

A.2 Câmara de Combustão ---- 154

APÊNDICE B **156**

TELAS DO PROGRAMA GASEQ PARA ANÁLISE TERMOQUÍMICA DOS FLUIDOS DE TRABALHO DO CFX **156**

B.1 Interface para Entrada e Saída de Dados ---- 156

B.2 Interface com Reações em Numero de Moles ---- 157

B.3 Interface com Reações em Massa ---- 158

APÊNDICE C **160**

GUIA DE UTILIZAÇÃO DO CFX PARA CÂMARAS DE COMBUSTÃO **160**

C.1 Definição do Problema Físico ---- 160

C.2 Definição do Domínio Geométrico ---- 160

C.3 Definição das Condições de Cálculo ---- 163

C.4 Obtenção da Solução Numérica ---------- 167
APÊNDICE D 175
EQUACIONAMENTO DE UM MODELO DE TURBULÊNCIA 175
D.1 Escoamento Turbulento ---------- 175
D.2 Energia Cinética Turbulenta e Dissipação da Energia devido à Turbulência --------- 176
D.3 Modelos de Turbulência ---------- 178
D.4 Teoria de Boussinesq ---------- 182
D.5 Equações para a Energia Cinética---------- 183
D.5.1. Equação Exata ---------- 183
D.5.2. Modelo da Equação ---------- 186
D.6 Modelo de Turbulência à Duas Equações---------- 188
D.6.1. Modelo da Equação para ε ---------- 188
D.6.2. Modelo de Turbulência RNG k-ε---------- 189
APÊNDICE E 193
EQUACIONAMENTO DE UM MODELO DE COMBUSTÃO 193
E.1 Generalidades ---------- 193
E.2 Modelo EBU ("Eddy Break Up") ou EDM ("Eddy Dissipation Model") ---------- 196
E.3 Equação de Kuramoto-Sivashinski ---------- 201
APÊNDICE F 203
EQUACIONAMENTO DO PROCESSO DE COMBUSTÃO 203
F.1 Definição dos Parâmetros Básicos para Reações de Combustão ---------- 203
F.2 Definição das Equações Gerais de Transporte da Espécies, Quantidade de Movimento e Energia para a Combustão ---------- 205
APÊNDICE G 211
RESUMO DOS ARTIGOS DESENVOLVIDOS 211
G.1 Publicações em Congressos---------- 211
G.2 Publicações em Periodicos ---------- 215

Lista de Figuras

Figura 1. 1 Distribuição das unidades de geração no setor elétrico brasileiro, MME (2006): Central Geradora Hidrelétrica (CGH), Central Geradora Eolielétrica (EOL), Pequena Central Hidrelétrica (PCH), Central Geradora Solar Fotovoltaica (SOL), Usina Hidrelétrica de Energia (UHE), Usina Termelétrica de Energia (UTE), Usina Termonuclear (UTN) ---------- 2
Figura 1. 2 Estrutura simplificada de uma região de uma chama, destacando os tempos característicos e velocidades de propagação do escoamento e da chama: região 1, onde ocorre o pré-aquecimento da mistura; região 2, onde ocorre a reação e liberação de energia e luminescência; e região 3, onde ocorre a propagação dos gases quentes, Poinsot e Veynante (2005) e Williams (1985) ---------- 4
Figura 1. 3 Micro turbina a gás instrumentada do laboratório do NEST adotada para a realização das simulações---------- 6

Figura 2. 1 –Turbina a Gás de Frank Whittle ----------22
Figura 2. 2 Micro Turbina a Gás desenvolvida para aeromodelos ----------23
Figura 2. 3 Microtubina a gás: (a) Esquema básico do Ciclo Brayton; (b) Diagrama T-s real (com irreversibilidades e perdas de pressão) ----------24
Figura 2. 4 Eficiência da micro turbina a gás em função da razão de pressão do compressor e da temperatura do gás na entrada da turbina, EPA (2002) ----------25
Figura 2. 5 Custo unitário da instalação das micro turbinas a gás em função da potência instalada, EPA (2002) ----------25
Figura 2. 6 Micro turbina de 80 [kW] com emissão de NOx de 25 [ppmv] à 15 [%[de O_2 e eficiência global de 80 [%] (com recuperador) da fabicante Bowman Power (2006) ----------27
Figura 2. 7 Micro turbina modelo C65 com potência de 65 [kW], eficiência global 82 [%] e emissão de NOx menor do que 5 [ppmv] à 15 [%[de O_2 para operar com gás natural da fabricante Capstone Micro Turbines (2006) ----------27
Figura 2. 8 Micro turbina modelo T100 CHP com potência de 100 [kW], eficiência global 77 [%] e emissão de NOx menor do que 15 [ppmv] à 15 [%[de O_2 para operar com gás natural da fabricante Turbec----------27
Figura 2. 9 Micro turbina modelo CHP com potência de 100 [kW], eficiência global 75 [%] e emissão de NOx menor do que 24 [ppmv] à 15 [%[de O_2 para operar com gás natural da fabricante Elliot Micro Turbines (2006) ----------28
Figura 2. 10 Diferentes micro turbinas a gás, Solar Perkins Mars, Turbo-Genset e Harvester Company, respectivamente da esquerda para a direita----------28

Figura 2. 11 Esquema de um ciclo híbrido de célula à combustível de óxido sólido com micro turbina a gás, com um recuperador de calor, um trocador de calor, duas unidades de compressão e um gerador elétrico, Camparani (2000)----------30
Figura 2. 12 APU modelo APIC APS3200 para aviões Airbus fabricado pela Pratt Whitney (2006) ----------30
Figura 2. 13 Principais componentes de micro turbina a gás fabricada pela Capstone Turbines (2006) ----------31
Figura 2. 14 Característica de auto ignição de alguns combustíveis, Lefebvre (1983) ---------41
Figura 2. 15 Curvas características referentes ao tempo de combustão necessário para atingir a pressão máxima da combustão completa para a combustão do metano com ou sem turbulência, em função da razão de equivalência (a proporção estequiométrica corresponde à razão de equivalência 10 [%] para o metano), Poinsot e Veynante (2005) ----------45
Figura 2. 16 Estrutura da chama com escoamento turbulento, Williams (1985) ----------47
Figura 2. 17 Esquema da transferência de calor em câmaras de combustão, Lefebvre (1983) 48
Figura 2. 18 Concentrações de NOx e CO típicas em câmaras de combustão tubulares, Lefebvre (1995)----------52
Figura 2. 19 Evolução esperada para a eficiência das micro turbinas, Massardo et al. (2000) 55
Figura 2. 20 Expectativas de volução no desenvolvimento das micro turbinas, Massardo et al. (2000) ----------55
Figura 2. 21 Câmara de combustão ULN, fabricante COEM, http://www.coen.com----------57

Figura 3. 1 Esquema básico da modelagem e da simulação----------59

Figura 4. 1 Micro turbina a gás testada, modelo T-62T – 32 da SOLAR ----------89
Figura 4. 2 Micro turbina a gás T-62T – 32 nas dependências do Laboratório de Sistemas Térmicos do NEST – UNIFEI ----------89
Figura 4. 3 Câmara de combustão desmontada ----------90
Figura 4. 4 Vista lateral da câmara de combustão. No detalhe à direita, o injetor de combustível com o estrangulamento ----------91
Figura 4. 5 Esquema elaborado pelo GateCycle para a micro turbina testada ----------92
Figura 4. 6 Modelo geométrico da câmara de combustão elaborado pelo CAD no Mechanical DeskTop.----------95
Figura 4. 7 Modelo exportado no ANSYS CFX v.57: (a) vista frontal; (b) vista lateral -------95
Figura 4. 8 Detalhes do modelo: (a) injetor; (b) orifícios de ar secundário; (c) orifícios do Liner; e (d) entrada de ar e exaustão do gás quente ----------96

Figura 4. 9 Vista lateral da malha ----------97
Figura 4. 10 Detalhes da malha: (a) na região próxima ao injetor; e----------97
Figura 4. 11 Superfícies de controle para o segundo modelo geométrico: (a) Vista frontal; (b) Vista lateral----------98

Figura 5. 1 Distribuição de velocidade média do escoamento para a malha 1---------- 109
Figura 5. 2 Distribuição de velocidade média do escoamento para a malha 2---------- 109
Figura 5. 3 Distribuição de velocidade média do escoamento para a malha 3---------- 110
Figura 5. 4 Pontos de referência na câmara Floxcom---------- 110
Figura 5. 5 Magnitude da velocidade média adimensional do escoamento ao longo da câmara Floxcom para as malhas 1,2 e 3, identificadas por GM 2.76, GM 2.75 e GM 2.70, respectivamente, em relação aos dados experimentais (curva tracejada) do Projeto FLOXCOM---------- 111
Figura 5. 6 Diferença das magnitudes da velocidade média adimensional do escoamento na câmara Floxcom para as malhas 1, 2 e 3 com comprimento do maior lado do elemento de volume iguais a 2,76 (mm), 2,75 (mm) e 2,70 (mm), respectivamente em relação aos dados experimentais---------- 111
Figura 5. 7 Modelo k-ε:- Distribuição de velocidade média. ---------- 112
Figura 5. 8 Modelo RNG k-ε - Distribuição de velocidade média.---------- 113
Figura 5. 9 Modelo SST - Distribuição de velocidade média. ---------- 113
Figura 5. 10 Magnitude da velocidade media adimensional do escoamento ao longo da câmara Floxcom para diferentes modelos de turbulência em relação aos dados experimentais (curva tracejada). ---------- 114
Figura 5. 11 Diferença das magnitudes da velocidade média adimensional do escoamento na câmara Floxcom para diferentes modelos de turbulência em relação aos dados experimentais114
Figura 5. 12 Distribuição de temperatura radial obtida pelo teste experimental e pelos modelos de combustão para o experimento 1, Wunning (1996)---------- 115
Figura 5. 13 Distribuição de temperatura do ar obtida pelo teste experimental e pelos modelos de combustão para o experimento 2, Weber et al (1999)---------- 116
Figura 5. 14 Aspecto da curva de convergência obtida após 2000 iterações para a simulação aerodinâmica da câmara de combustão anular, utilizando modelo de turbulência SST ------ 118
Figura 5. 15 Distribuição de velocidade média ao longo de um plano longitudinal na câmara de combustão anular utilizando o modelo de turbulência SST, com identificação de quatro regiões com escoamentos típicos. ---------- 119

Figura 5. 16 Vetor velocidade média ao longo de um plano longitudinal na câmara de combustão anular utilizando o modelo de turbulência SST ---------- 120
Figura 5. 17 Magnitude da velocidade média adimensional ao longo de um plano longitudinal na câmara de combustão anular utilizando o modelo de turbulência SST com escoamento em regime permanente e nas condições nominais de projeto. ---------- 120
Figura 5. 18 Pontos de referência na câmara de combustão anular da Solar Turbines. ------- 121
Figura 5. 19 Distribuição de pressão total relativa ao longo de um plano longitudinal na caâmra de combustão anular da micro turbina do NEST utilizando o modelo de turbulência SST em regime permanente e nas condições nominais de projeto ---------- 121
Figura 5. 20 Magnitude da velocidade média relativa ao longo de dois planos tranversais na câmara de combustão da solar turbines nas posições x/L = 0,25 e x/L = 0,50---------- 122
Figura 5. 21 Campo de velocidade em um plano paralelo ao eixo de um injetor ---------- 123
Figura 5. 22 Campos de velocidade média: a) EDM; b) FM---------- 124
Figura 5. 23 Campos de pressão média relativa: a) EDM; b) FM ---------- 124
Figura 5. 24 Campo de temperatura total média: a) EDM; b) FM ---------- 124
Figura 5. 25 Localização do eixo de referência **X** a partir da saída do injetor (à direita) na direção longitudinal da câmara. ---------- 125
Figura 5. 26 Representação da velocidade média característica da câmara funcionando com gás metano ---------- 126
Figura 5. 27 Representação da pressão relativa média característica da câmara funcionando com gás metano ---------- 126
Figura 5. 28 Representação da temperatura total média característica da câmara funcionando com gás metano e do ponto de referência da temperatura da chama adiabática calculada pelo programa Gaseq v. 7.2 ---------- 127
Figura 5. 29 Campo de velocidade média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 128
Figura 5. 30 Campo de pressão média relativa num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 128
Figura 5. 31 Campo de temperatura total média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 128
Figura 5. 32 Campo de velocidade média em três planos transversais localizados nas posições x/L = 0,20, x/L = 0,40 e x/L = 0,70 no tubo de chama---------- 129
Figura 5. 33 Campo de temperatura total média na exaustão do tubo de chama ---------- 130

Figura 5. 34 Campo de velocidade média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 131
Figura 5. 35 Campo de pressão média relativa num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 131
Figura 5. 36 Campo de temperatura total média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 132
Figura 5. 37 Campo de temperatura total média em dois planos transversais localizados nas posições x/L = 0,20 e x/L = 0,40 no tubo de chama ---------- 132
Figura 5. 38 Campo de temperatura total média em dois planos transversais localizados nas posição x/L = 0,70 no tubo de chama ---------- 133
Figura 5. 39 Campo de temperatura total média na exaustão do tubo de chama ---------- 133
Figura 5. 40 Representação da velocidade média adimensional ao longo do plano longitudinal na câmara, em relação às velocidades máximas Vo obtidas pelos modelos de combustão FM e EDM nos pontos de referência, respectivamente, 423 [m/s] e 384 [m/s]---------- 135
Figura 5. 41 Representação da pressão característica: pressão média relativa adimensional ao longo do plano longitudinal na câmara, em relação às pressões máximas Po obtidas pelos modelos de combustão FM e EDM nos pontos de referência, respectivamente, 48835 [Pa] e 42508 [Pa] ---------- 135
Figura 5. 42 Representação da temperatura total média característica ao longo do plano longitudinal na câmara, em relação às temperaturas To da chama obtidas pelos modelos de combustão FM e EDM nos pontos de referência, respectivamente, 1942 [K] e 2209 [K] --- 135
Figura 5. 43 Distribuição do vetor velocidade num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama ---------- 137
Figura 5. 44 Linhas de corrente formadas no interior da câmara de combustão projetadas sobre um plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama------- 137
Figura 5. 45 Distribuição de temperatura na superfície da câmara de combustão usando metano e o modelo de combustão FM ---------- 138
Figura 5. 46 Formação de intenso gradiente de temperatura na superfície interna do tubo de chama, posição radial inferior nas proximidades do injetor---------- 138

Figura A. 1- (a) Micro turbina montada; (b) Detalhe dos injetores na carcaça ---------- 152
Figura A. 2- Carcaça externa desmontada---------- 153
Figura A. 3- (a) Turbina a gás e exaustor da câmara de combustão; (b) Detalhe do exaustor da câmara de combustão ---------- 153
Figura A. 4- Rotor da turbina a gás---------- 153

Figura A. 5 - Saída da Câmara de combustão: (a) vista externa; (b) vista interna ---------- 154
Figura A. 6 - Câmara de combustão: (a) vista externa; (b) vista interna ---------- 154
Figura A. 7 - Detalhe interno da câmara de combustão mostrando a conexão dos injetores de combustível à esquerda e à direita. No meio, a ignição---------- 155
Figura A. 8 - Detalhe externo da câmara de combustão mostrando a conexão dos injetores de combustível---------- 155

Figura B. 1- Interface do GASEQ®, com identificação dos principais itens de entrada e saída de dados---------- 157
Figura B. 2 - Tela do GASEQ para o gás natural em unidade de número de mols obtida após 3 iterações---------- 158
Figura B. 3 - Tela do GASEQ para o gás natural em unidade de massa obtida após 3 iterações159

Figura C. 1- Tela do CFX launcher para acessar ferramentas CFX---------- 169
Figura C. 2 - Tela principal do CFX Build para a definição da geometria do problema ----- 169
Figura C. 3 - Tela do CFX Build para importação do modelo no formato IGES---------- 169
Figura C. 4 - Tela do CFX Build para visualização do modelo sólido criado ---------- 170
Figura C. 5 - Tela do CFX Build para visualização da malha ---------- 170
Figura C. 6 - Tela principal do CFX Pre para a definição das condições de cálculo---------- 171
Figura C. 7 - Tela do CFX Pre para a definição da mistura para a Reação de Combustão--- 171
Figura C. 8 - Detalhe na tela do CFX Pre para a definição do domínio de cálculo ---------- 172
Figura C. 9 - Detalhe na tela do CFX Pre para a definição das condições de contorno ------ 172
Figura C. 10 - Tela do CFX Pre para a definição das condições iniciais---------- 172
Figura C. 11 - Detalhe na tela do CFX Pre para a definição das condições de convergência 172
Figura C. 12 - Detalhe na tela principal do CFX Pre para iniciar iniciar calculos no CFX Solver---------- 173
Figura C. 13 - Tela principal do CFX Solver para a execução dos cálculos ---------- 173
Figura C. 14 - Tela do CFX Solver após a execução dos cálculos ---------- 173
Figura C. 15 - Tela principal do CFX Post para visualozação dos resultados ---------- 174
Figura C. 16 - Tela do CFX Post com plano de referência 1 sobre a distribuição de velocidade do escoamento---------- 174
Figura C. 17 - Tela do CFX Post com plano de referência 2 sobre a distribuição de temperatura ---------- 174

Figura D. 1- Espectros da energia cinética κ: I representa a região com grande escala de turbulência, energia contem vórtices; II representa a sub região inercial; e III representa a região com pequena escala de turbulência, meios isotrópicos, Davidxon (2003) ---------- 177
Figura D. 2 Tensão cisalhante do escoamento próxima a uma parede, Davidxon (2003) --- 181
Figura D. 3 Balanço de energia na equação k para um escoamento entre superfícies planas paralelas com distância adimensional y+: (a) Comparativo com relação ao termo de dissipação ε; (b) Comparativo com relação ao termo difusão viscosa, Davidxon (2003) ---- 187
Figura D. 4 Balanço da equação k sobre a camada limite ao longo de uma placa plana ---- 190

Figura E. 1 Curvas características referentes ã evolução da temperatura computada com as técnicas RANS, DNS e LES para chama com escoamento turbulenta, Poinsot e Veynante (2005) ---------- 194
Figura E. 2 Espectro de energia dissipada pela turbulência em função da intensidade da turbulência k para as técnicas RANS, DNS e LES para chama com escoamento turbulenta, utilizando escala di-log, Poinsot e Veynante (2005) ---------- 195
Figura E. 3 Comparação entre o modelo EBU com o Modelo de Arrhenius para chamas pré-misturadas com escoamento turbulento, Peters (2002) ---------- 201

Lista de Tabelas

Tabela 2. 1 - Micro turbinas instaladas no mundo, Antonio et. al. (2003) ----------26
Tabela 2. 2 Diferenças básicas entre câmaras de combustão, Lefebvre (1983----------37
Tabela 2. 3 Emissões das micro turbinas a gás da Capstone e da Volvo, Eli Eber (2003) -----51
Tabela 2. 4 Comparação das emissões de micro turbinas a gás, turbinas a gás e motores alternativos de combustão interna, Eli Eber (2003) ----------51

Tabela 3. 1 Valores típicos das constantes dos modelos de turbulência----------67
Tabela 3. 2 Valores típicos das constantes do modelo de turbulência SST k-ω ----------69
Tabela 3. 3 Aplicação dos modelos de combustão ----------76

Tabela 4. 1 Dados técnicos do equipamento segundo o fabricante----------90
Tabela 4. 2 Valores obtidos pelo GateCycle para a micro turbina testada ----------92
Tabela 4. 3 Composição química do gás natural, Abreu e Martinez (1999) ----------93
Tabela 4. 4 Composição dos reagentes e produtos da reação de combustão para o gás natural obtida pelo GASEQ® v7.2. ----------94
Tabela 4. 5 Condições de Contorno para o Estudo Aerodinâmico ----------98
Tabela 4. 6 Dados fornecidos pelo GASEQ ® v 7.6 para Definição dos Fluidos de Trabalho no CFX----------99
Tabela 4. 7 Condições de Contorno para o Gás Metano no estudo Termo-Aerodinâmico pelo CFX----------99
Tabela 4. 8 Fração mássica dos produtos da combustão do gás natural para a definição das condições iniciais no CFX a partir do GASEQ ® v 7.6 ---------- 100
Tabela 4. 9 Condições de convergência aplicadas---------- 107

Tabela 5. 1 Malhas testadas segundo o tamanho do elemento de volume e das condições de convergência.---------- 109
Tabela 5. 2 Resultados obtidos para o modelo de combustão EDM ---------- 125
Tabela 5. 3 Resultados obtidos para o modelo de combustão FM ---------- 125
Tabela 5. 4 Resultados obtidos para o modelo de combustão FM ---------- 130
Tabela 5. 5 Resultados obtidos para o modelo de combustão EDM ---------- 134

Tabela E. 1 Comparação entre as técnicas RANS, DNS e LES sob o aspecto das simulações numéricas da combustão com escoamento turbulento, Peters (2000)---------- 196

Simbologia

Letras Latinas

A	Constante de proporcionalidade, que depende das propriedades físicas dos reagentes e se ocorre ou não pré-mistura;
	Constante que depende das propriedades físicas dos produtos e da natureza da reação química em cadeia com ou sem ramificações, formadas pelos radicais livres, no cálculo da taxa dos produtos;
	Constante de proporcionalidade na **Equação de Zimont**;
	Coeficiente Linear de Anisotropia no modelo de radiação Aproximação Diferencial ou P1;
	Coeficiente linear de anisotropia;
[A]	Concentração molar ou mássica da espécie A
A_C	Área da superfície interna da carcaça [m^2];
A_L	Superfície da chama laminar [m^2];
	Área transversal de referência no tubo de chama [m^2];
A_K	Constante de proporcionalidade na Taxa de Reação de Arrhenius;
A_{AN}	Área transversal de referência no anular ou câmara de resfriamento [m^2];
A_{REF}	Área transversal da câmara de combustão do tipo anular, em [m^2];
A_W	Área da superfície interna do tubo de chama [m^2];
B_K	Constante que representa a direção das reações reversíveis (produtos para reagentes);
C_1	Convecção de calor do gás para as paredes do tubo de chama [W / m^2];
C_2	Convecção de calor do gás das paredes do tubo de chama para o ar da carcaça [W / m^2];
$C_{\varepsilon 1}$	Coeficiente da equação de transporte para o modelo de turbulência k -ε;
$C_{\varepsilon 2}$	Coeficiente da equação de transporte para o modelo de turbulência k - ε;
C_μ	Coeficiente da equação de transporte para o modelo de turbulência k - ε;
C_p	Calor específico à pressão constante [J / kg.K];
Da	Número de Damkholer (adimensional);
D_{AN}	Diâmetro do anular ou câmra de resfriamento [m^2];
D_L	Diâmetro interno do tubo de chama [m];
D_K	Coeficiente de difusão de Fick para a espécie k
D_{REF}	Diâmetro de referência externo da câmara de combustão do tipo anular, em [m];
D_0	Diâmetro médio do injetor do combustível [m];
d	Diâmetro do orifício do injetor [m];
	Dimensão característica da escala de turbulência [m];
E	Energia total do sistema;
$E_{b,j}$	Energia de radiação de corpo negro no modelo de radiação P1
E_K	Energia de Ativação na Taxa de Reação de Arrhenius;

$E(\kappa)$	Espectro de energia;
e	Energia total química;
erfc	Função Erro Complementar;
ez	Vetor unitário na direção **z**;
es	Energia sensível;
e_t	Energia total especifica do sistema;
[F]	Concentração molar do combustível na mistura;
f(x)	Função Densidade de Probabilidade;
f_C	Fração ar e combustível na mistura (adimensional);
$F_{k,j}$	Força de campo gravitacional atuante na espécie k na direção j;
F_K	Constante que representa a direção das reações reversíveis (Reagentes para produtos);
G	Fator de Extensão na Equação de Zimont (adimensional);
	Intensidade da radiação Incidente [J / m^2];
g	Força de campo (gravitacional) no meio na Equação de Navier Stokes, aceleração da gravidade [m / s^2];
H	Entalpia total do escoamento para misturas homogêneas;
h	Entalpia específica do meio [kcal / kg];
h_i	Entalpia especifica da espécie na mistura [kcal/kg];
h_s	Entalpia sensível da mistura;
$h_{s,k}$	Entalpia sensível da espécie k;
[I]	Concentração molar de cada espécie entre os reagentes [mol / m^3];
	Índice de uma espécie química em uma reação;
I_{v0}	Intensidade da radiação saindo da parede no Modelo de Radiação do tipo Transferência Discreta de Calor [kcal / kg];
I_b	Intensidade da emissão do corpo negro [kcal / kg];
I_{bv}	Intensidade da radiação devida ao corpo negro no Modelo de Radiação do tipo Transferência Discreta de Calor [kcal / kg];
I_L	Espessura da chama;
I_n	Intensidade da radiação espectral [kcal / kg];
I_v	Intensidade média da radiação no Modelo de Radiação do tipo Transferência Discreta de Calor [kcal / kg];
K_{av}	Coeficiente de absorção do meio (adimensional);
$K_{b,\,v}$	Coeficiente de absorção do corpo negro;
K_{exp}	Coeficiente experimental da taxa de reação da mistura;
K_s	Coeficiente de reflexão na equação de fluxo total da radiação (adimensional);
K_{sv}	Coeficiente de reflexão do meio (adimensional);

k	Intensidade da Turbulência;
	Taxa especifica de consumo obtida pela equação de Arrhenius [kg / s];
	Condutividade térmica [J / m^2];
	Condutividade térmica no Modelo de Rosseland [J / m^2];
	Índice de uma reação química elementar;
	Energia cinética devido à turbulência
	Índice de uma espécie elementar
k_{1-2}	Condução de calor através da parede do tubo de chama [W / m^2];
k_r	Condutividade Térmica Geral no Modelo de Rosseland [W / m . K];
k_G	Condutividade Térmica do gás [W / m . K];
L	Comprimento do tubo de chama [m];
	Distância percorrida pela chama na zona de combustão [m];
Le	Numero de Lewis (adimensional);
L_t	Comprimento da chama turbulenta na Equação de Zimont [m];
l	Comprimento da mistura segundo Prandtl;
M	Mistura de espécies químicas;
	Massa molecular;
m	Valor médio de uma amostra de variáveis aleatórias escolhidas em um dado intervalo, conhecido o desvio padrão médio do Modelo de Monte Carlo;
	Massa total de gás;
m_k	Massa da espécie química k;
m_{AN}	Vazão mássica no anular ou câmara de resfriamento para o ar [kg / s];
m_{PZ}	Vazão mássica na zona primária do ar [kg / s];
$\dot{m}_a$	Vazão mássica do ar nos injetores [kg/s];
m_3	Vazão mássica na entrada de ar [kg/s];
N	Quantidade total de espécies;
n	Quantidade de amostras no Modelo de Monte Carlo;
	Número de moléculas no modelo PDF;
	Número de mols total;
n_k	Número de moles da espécie k;
P	Pressão do gás na combustão [Pa];
	Função probabilidade;
$\tilde{P}$	Pressão média do gás;
p	Flutuação de pressão devido à turbulência;
P_2	Pressão estática na entrada da câmara de combustão [Pa];
P_3	Pressão dinâmica na entrada de ar [Pa];
Prt	Número de Prandtl;num escoamento turbulento;

$\dot{Q}$	Energia específica devido à geração interna de calor [J / kg];
q	Fluxo de calor por radiação [J /m^2];
q_c	Fluxo de calor por convecção [J/s];
q_i	Quantidade de calor trocada no meio na direção **x** [J / kg];
q_R	Fluxo de calor por radiação [J / s];
$Q_{r,w}$	Fluxo de calor por radiação da parede [J / s];
Q_j	Quantidade de calor trocada no meio na direção **y** [J / kg];
R	Razão em peso estequiométrico ar / combustível;
	Constante geral dos gases e igual a 8,314 [J / Mol. K];
R_K	Taxa de reação de Arrhenius;
R	Percentual de reflexão da radiação;
	Vetor posição;
	Raio de referência correspondente à parte externa do tubo de chama;
R_2	Radiação de calor entre tubo de chama e carcaça;
R_3	Radiação de calor do gás quente para a parede do tubo de chama;
R_{KI}	Coeficiente estequiométrico / ordem da reação do componente **I** na reação elementar **k**
Sc	Número de Schmidt (adimensional);
S_E	Energia molecular dos fluidos da mistura;
S_I	Taxa de consumo e produção de espécies químicas [mol / s];
S_{IJ}	Tensor de Cisalhamento Médio;
S_M	Somatório da força do campo gravitacional atuante em cada fluido;
s	Vetor direção da radiação emitida por uma superfície;
	Variável equivalente ao tempo quando se aplica a Transformada de Laplace na equação principal do Modelo de Radiação do tipo Transferência Discreta de Calor;
s´	Comprimento do caminho percorrido pela radiação [m];
T	Temperatura absoluta do meio [K];
	Temperatura absoluta do gás na combustão [K];
t	Tempo [s];
T	Temperatura absoluta da mistura na região da chama para dada posição (x,y,z) [K];
Tc	Temperatura de referência da chama [K];
t_{CHEM}	Tempo de residência na chama [s];
t_{FLOW}	Tempo do escoamento [s];
Tg	Temperatura do gás nas proximidades da parede na equação de radiação emitida por uma parede [K];
To	Temperatura de referência do meio [K];
T_3	Temperatura do ar na entrada do anular ou tubo de resfriamento [K];
T_{PZ}	Temperatura do gás na zona primária [K];

T_{ST}	Temperatura da chama estequiométrica [K];
Tw	Temperatura na parede na equação de radiação emitida por uma parede [K];
U	Raiz quadrada da velocidade da chama turbulenta;
	Velocidade do escoamento na direção **x** [m/s];
U_i	Velocidade do escoamento [m/s];
$\widetilde{U}_i$	Velocidade média do escoamento [m/s];
u_i	Flutuação da velocidade do escoamento devido à turbulência [m/s];
V	Velocidade do escoamento numa mistura homogênea [m/s];
Vc	Volume da câmara de combustão [m^3];
Ve	Volume empregado na vaporização do combustível [m^3];
Vi	Projeção da velocidade do escoamento na direção x;
Vj	Projeção da velocidade do escoamento na direção y;
$V_{k,i}$	Velocidade de difusão da espécie k na direção i;
V_k^L	Velocidade de difusão de Kirschfelder e Curtis;
V	Velocidade do escoamento na direção **y** [m /s];
vs	Coeficiente estequiométrico;
W	Velocidade média de propagação da chama [m/s];
X	Fração molar total (adimensional);
x	Coordenada cartesiana
x_i	Posição de referência no meio escoante na direção x [m];
x_j	Posição de referência no meio escoante na direção y [m];
x_K	Fração molar da espécie k;
Y_k	Fração mássica total (adimensional);
	Coordenada cartesiana;
$\widetilde{Y}_I$	Fração molar média da espécie química i;
Z	Coordenada cartesiana;
Z_{COMB}	Fração mássica de combustível na mistura (adimensional);
Z_J	Fração mássica da espécie química j (Carbono ou hidrogênio) (adimensional);
$\widetilde{Z}$	Fração mássica média da mistura;
$Z_{OXIDANTE}$	Fração mássica do oxidante na mistura (adimensional);

Letras Gregas

α	Razão ar / combustível;
	Número de átomos de carbono no hidrocarboneto;
	Grau de reação;
β	Parâmetro usado para calcular o coeficiente C_{e1} no modelo de turbulência RNG k - ε;
	Número de átomos de hidrogênio no hidrocarboneto;
	Coeficiente de Excitação (isto é, absorção mais reflexão) na equação de fluxo total da radiação;
β_K	Coeficiente de temperatura adimensional na Taxa de Reação de Arrhenius;
χ	Concentração em massa do gás no injetor, na forma adimensional;
$\tilde{\chi}$	Taxa de dissipação na mistura;
χ_{ST}	Taxa de Dissipação em condição estequiométrica [J / s];
ΔA_{W1}	Área da superfície interna da parede do tubo de chama [m^2];
ΔA_{W2}	Área da superfície externa da parede do tubo de chama [m^2];
Δh	Variação da entalpia [kcal];
$\Delta h^{o}_{f,k}$	Entalpia de formação mássica da espécie k na temperatura de referência To;
ΔP	Perda de carga no no tubo de chama [Pa];
∇E_{bv}	Gradiente da energia total no corpo negro na equação de fluxo total da radiação [J];
∇Z_{ST}	Gradiente da fração mássica das espécies em mistura segundo a taxa de dissipação de Linan (1961);
δ	Amostra no Modelo de Monte Carlo;
δi	Valor amostral usado mo Modelo de Monte Carlo;
δ_{IJ}	Delta de Dirac;
δ_J	Variáveis aleatórias;
ε	Energia dissipada pela turbulência [J];
	Emissividade do meio pela Lei de Radiação de Stefan-Boltzmann para o Corpo Negro [W/m^2];
ε_{CR}	Valor crítico da energia de dissipação turbulenta [J];
ε_C	Emissividade da parede da carcaça;
ε_G	Emissividade do gás;
ε_W	Emissividade da parede do tubo de chama;
Φ	Razão de Equilíbrio entre ar e combustível;
	Variação da energia no sistema devido às irrervesibilidades;
	Função fase da reflexão devido a um sólido imerso no meio;
	Razão de equivalência para o gás metano;

ϕ	Ângulo de refração nas paredes na equação de radiação emitida por uma parede;
	Razão de equilíbrio da mistura;
$\Im$	Função mistura para o modelo de turbulência SST;
η	Parâmetro usado para calcular o coeficiente C_{e1} no modelo de turbulência RNG k - ε;
	Escala de comprimento de Kolmogorov [m];
η_0	Parâmetro usado para calcular o coeficiente C_{e1} no modelo de turbulência RNG k - ε;
η_{CC}	Eficiência da câmara de combustão;
η_{CE}	Eficiência da taxa de evaporação do combustível;
$\eta_{C\theta}$	Eficiência da taxa de reação;
$\eta_{TCOMBUSTÃO}$	Eficiência Térmica da Combustão;
κ	Constante de Von Karman para o modelo de turbulência SST;
$\gamma\pm$	Razão equivalente entre ar e combustível normalizado (adimensional);
γ	Coeficiente de excesso de ar;
γ_K	Peso específico da espécie k;
λ	Condutividade térmica da mistura ignitável;
λ_{eff}	Valor efetivo da constante de evaporação do combustível na temperatura ambiente m^2/s;
λ_u	Condutividade térmica na Equação de Zimont (adimensional);
μ	Viscosidade dinâmica [kg/m.s];
μ_T	Viscosidade dinâmica devido à turbulência;
μ^*	Média aritmética;
μ_{STR}	Coeficiente empírico do modelo de combustão com Pré-mistura, cujo valor universal é 0.28;
ν	Desvio padrão médio;
	Freqüência na Equação de Transporte de Radiação Espectral [Hz];
	Viscosidade cinemática [m^2/s]
	Escala de viscosidade de Kolmogorov;
ν^*_{KI}	Coeficiente estequiométrico das espécies reagentes k;
ν^{**}_{KI}	Coeficiente estequiométrico das espécies produtos k;
θ	Fator de Lefebvre para estimar a eficiência da combustão, na forma adimensional;
Θ	Temperatura reduzida utilizada pelo modelo de combustão EDM;
ρ	Massa especifica do fluido [kg /m^3];
ρo	Massa específica inicial [kg /m^3];
ρ_{PZ}	Massa específica do gás na zona primaria [kg /m^3];
ρ_K	Massa específica da espécie k [kg /m^3];
ρ_u	Massa específica da mistura de não reativos [kg /m^3];
σ	Constante de Stefan Bolztmann e igual a 5.6705119. 10^{-8} [W/m^2K^4];
	Desvio padrão de uma distribuição de probabilidade;
σ^*	Desvio padrão;

σ_C	Número de Schmidt (adimensional);
σ_ε	Coeficiente da equação de transporte de energia dissipada no modelo k - ε;
σ_k	Coeficiente de Prandtl da equação de transporte de turbulência no modelo k - ε;
τ	Tempo de residência médio (volume da câmara dividido pela vazão volumétrica do fluido) [s];
	Escala de tempo de Kolmogorov;
τ_{chem}	Tempo químico de Kolmogorov, conforme a escala de turbulência na combustão [s];
τ_{Fuel}	Tempo de residência do combustível [s];
$\tau_{i,j}$	Tensor deformação devido à viscosidade e À gradiente de velocidade;
$\wp$	Coeficiente de difusão de Fixk;
Ω	Ângulo do sólido [graus];
	Ângulo do sólido através de pontos discretos distribuídos sobre o corpo imerso no meio que irradia calor [graus];
ω	Intensidade da vorticidade de Von Karman;
ω_K	Taxa de reação da espécie k;
ω_T	Quantidade de calor gerado em uma reação de combustão (adimensional);
$\overline{\omega}_F$	Taxa de reação no modelo de combustão EDM;
ψ	Coeficiente de escorregamento na equação de radiação emitida por uma parede;
	Energia específica no meio devido à transferência de calor pelo atrito do fluido com as paredes por onde escoa (adimensional);
	Fator de perda de carga no tubo de chama;
Γ_i	Coeficiente de difusão molecular da espécie i;
Γ_{REF}	Coeficiente de difusão molecular da mistura;

Subscritos

0	Índice adotado como referência na saída do injetor;
2	Relativo a entrada da câmara de combustão;
α	Relativo à razão de pressão e de empuxo na turbina a gás;
a	Relativo ao ar;
av	Indicie do coeficiente de absorção da radiação no meio;
b	Relativo à radiação do corpo negro;
bν	Relativo à radiação do corpo negro simulado pelo modelo de Transferência Discreta;
CE	Relativo a taxa de evaporação do combustível;
COMB	Relativo ao combustível;
Cθ	Relativo a taxa de reação;
e	Relativo ao gás;
ε1	Índice da primeira constante definida para o modelo de turbulência k - ε;
ε2	Índice da segunda constante definida para o modelo de turbulência k - ε;
eff	Efetivo;
F	Relativo a chama;
g	Relativo ao gás;
M	Mistura;
μ	Índice para o coeficiente da equação de transporte para o modelo de turbulência k - ε;
n	Relativo ao espectro da radiação térmica;
ν	Relativo a radiação térmica no meio;
ν0	Relativo à radiação que surge na superfície de um corpo;
OXIDANTE	Relativo à substância oxidante de uma reação de combustão;
p	Pressão, produtos da combustão;
PZ	Relativo a zona primária da câmara de combustão;
r	Radiação;
REF	Referência;
s	Relativo a reflexão na equação de fluxo total da radiação;
Σ	Totalização de uma espécie em uma reação química numa dada posição da câmara de combustão;
ST	Relativo à chama estequiométrica;
STR	Relativo ao coeficiente empírico do modelo de combustão com Pré-mistura;
sv	Relativo a reflexão da radiação no meio;
To	Relativo à temperatura do fluido na saída do injetor;
u	Relativo à condutividade térmica na equação de Zimont;
w	Relativo à parede;

Siglas

ACT	Advanced Combustion Tool
ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
ANP	Agência Nacional do Petroleo
APU	Auxiliary Power Unity
ASTM	American Society for Testing and Material Standards
CFD	Computational Fluid Dynamic
CNP	Conselho Nacional do Petroleo
DES	Detached Eddy Simulation
LES	Large Eddy Simulation
DLN	Dry Low NOx
DNC	Departamento Nacional de Combustiveis
DNS	Direct Numerical Simulation
EBU	Eddy Break Up
EDM	Eddy Dissipation Model
EERC	Environment Energy Research Corporation
EPA	Environment Protection Association
FM	Flamelet Model
HITAC	High Temperature Air Combustion
IEM	Instituto de Engenharia Mecânica
IEPG	Instituto de Engenharia de Produto e Gestão
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Especiais
IP	Portal Interno da ANP
IRCM	Infinite Rate Chemistry Model
ISSN	International Standard Serial Number
ITA	Instituto de Engenharia da Aeronáutica
MDF	Método de Diferenças Finitas
MEF	Método de Elementos Finitos
MVF	Método de Volume Finito
MVFE	Método de Volume Finito Espectral
MME	Ministério de Minas e Energia
PDF	Probability Density Factor
PPG	Pesquisa e Pós-Graduação
PRPPG	Pré Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
NEST	Núcleo de Excelência em Sistemas Térmicos e Geração Distribuída
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RSM	Reynolds Stress Model

SCR	Selective Catalytilic Reduction
SST	Shear Stress Model
ULN	Ultra Low NOx
UNIFEI	Universidade Federal de Itajubá
WSEAS	World Scientific and Engineering Academy and Society

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 Aspectos Gerais

O uso de turbinas a gás para a geração de energia elétrica tem crescido gradualmente nos últimos anos, Gurgel e Mandela (2000) e Antonio *et al* (2003).

Segundo o Balanço Energético Nacional fornecido pelo Ministério de Minas e Energia-2006 (http://www.mme.gov.br) , a participação das unidades de geração termelétrica à turbina a gás no setor elétrico brasileiro já constitui mais de 21 [%] dos empreendimentos de geração elétrica em operação, totalizando uma potência de aproximadamente 44 [GW] em relação ao total instalado de 195 [GW], como mostra a Figura 1, comparativamente às outras unidades de geração de eletricidade. Esta participação pode aumentar nos próximos anos em decorrência da política energética atuante, a qual tem priorizado a implantação de sistemas termo - hidroelétricos, a fim de atender a demanda por energia elétrica no Brasil.

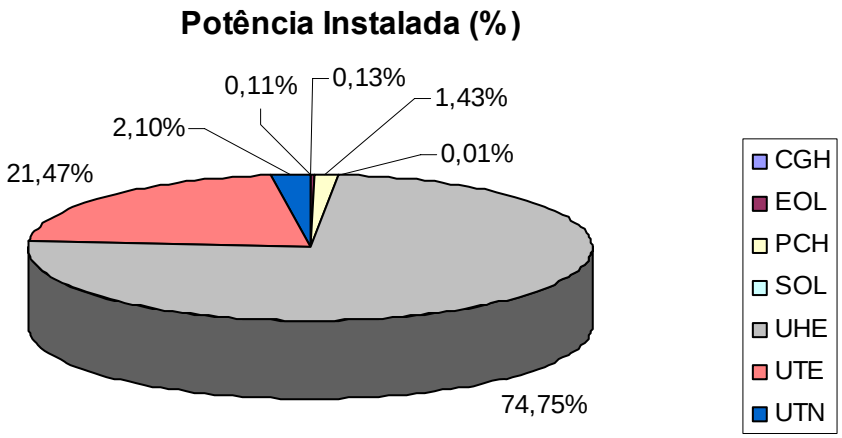


Figura 1. 1 Distribuição das unidades de geração no setor elétrico brasileiro, MME (2006): Central Geradora Hidrelétrica (CGH), Central Geradora Eolielétrica (EOL), Pequena Central Hidrelétrica (PCH), Central Geradora Solar Fotovoltaica (SOL), Usina Hidrelétrica de Energia (UHE), Usina Termelétrica de Energia (UTE), Usina Termonuclear (UTN)

De acordo com Gurgel e Mandela (2000), é fato que muitas pesquisas têm sido realizadas com a intenção de se obter maior eficiência e menor emissão de poluentes tanto em turbinas a gás, quanto em micro turbinas a gás. Para isso, a câmara de combustão tem sido o principal alvo destas pesquisas, as quais têm consistido tanto na realização de testes experimentais, quanto na aplicação de simulações numéricas, uma vez que este equipamento tem a finalidade de aumentar temperatura e a energia cinética dos gases ou fluido de trabalho, visando à expansão na turbina e a produção de potência útil.

Dentro do contexto de turbinas a gás, a complexidade das câmaras de combustão foi primeiro descrita por Lefebvre (1983), segundo o grande número de variáveis envolvidas, seja pela aerodinâmica, seja pela termodinâmica, que podem afetar a emissão de poluentes, temperatura máxima da chama e a eficiência da combustão.

Desta forma, a busca de projetos de câmaras de combustão mais eficientes tanto no aspecto termodinâmico quanto ambiental, tem em vista a emissão de NOx e CO por parte dos combustíveis fósseis empregados em grande parte do mundo. Isto tem levado os grandes laboratórios e fabricantes de Turbinas a Gás a buscar ferramentas alternativas para a análise do processo de combustão nestes equipamentos. Tais ferramentas constituem os chamados modelos numéricos de cálculo de escoamento reativo, uma das subáreas da dinâmica dos fluidos computacional (CFD), que aliados a computadores mais eficientes, têm permitido a análise de câmaras de combustão de forma mais rápida.

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) abrange três métodos numéricos básicos: a) Método de Diferenças Finitas; b) Método de Elementos Finitos; e c) Método de

Volumes Finitos. O último método tem sido aplicado à fenômenos de transporte, porque é conservativo.

Estas simulações numéricas permitem a otimização dos projetos a baixo custo sem a necessidade de grande número de experimentos para aquisição de dados.

Dentre as pesquisas que têm sido conduzidas para o levantamento dos principais parâmetros termo - aerodinâmicos que afetam o comportamento da chama em câmaras de combustão, com a aplicação de testes experimentais e de métodos numéricos mais precisos, podem ser destacados os trabalhos de Lee *et al*. (1990), Fuller e Smith (1994), Hamer e Roby (1997), Allen (1998), Melick *et al*. (1998), Yadigaroglu (1998), Gosselin *et al*. (2000), Peters (2000), Xinming (2001), Nickolaus *et al*. (2002), Lyckama *et al*. (2002), Wakabayashi *et al*. (2002), Vandebroek *et al*. (2003), Cristina e Tuccilo (2004), Jiang e Campell (2004), Koutsenko *et al*. (2004), e Parente *et al*. (2004).

Com base nestes trabalhos, é importante conhecer a estrutura da chama, que depende do tipo de chama. Para chamas com escoamento turbulento, sua estrutura pode ser constituída por três regiões distintas: a primeira região, onde ocorre o escoamento da mistura ar - combustível e já afetada pelo pré-aquecimento, devido à propagação do calor gerado pela combustão por convecção e radiação; a segunda região, onde ocorre a reação de combustão e a luminescência, também conhecida como Frente de Chama; e uma terceira região, onde os gases quentes produtos da combustão se afastam da região de combustão.

Dentre estas regiões da chama, o enfoque dos modelos de combustão se concentra na Frente de Chama, onde as moléculas do combustível se quebram e reagem com as moléculas do oxidante.

A Figura 1.2 apresenta um esquema simplificado da estrutura da chama em suas três regiões principais, destacando as locais de referência para indicar os tempos de deslocamento da mistura, tempo de residência da mistura reativa, tempo de choque da mistura com a zona de reação, tempo de reação química e liberação de energia (em amarelo, assinalando a zona de luminescência da chama), bem como as velocidades de propagação do escoamento e da chama, Poinsot e Veynante (2005) e Williams (1985).

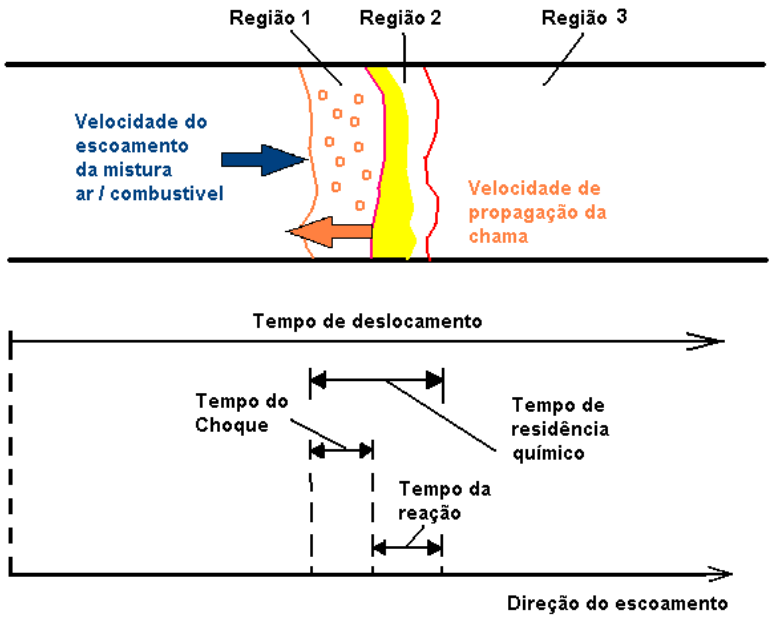


Figura 1. 2 Estrutura simplificada de uma região de uma chama, destacando os tempos característicos e velocidades de propagação do escoamento e da chama: região 1, onde ocorre o pré-aquecimento da mistura; região 2, onde ocorre a reação e liberação de energia e luminescência; e região 3, onde ocorre a propagação dos gases quentes, Poinsot e Veynante (2005) e Williams (1985)

Entre os modelos de escoamento turbulento utilizados pelo CFD, podem ser destacados: k-ε, RNG k-ε e RSM ("Reynolds Stress Model") e SST ("Shear Stress Model"). O modelo k-ε é o mais usado devido à sua estabilidade numérica, robustez e menor custo computacional, porém tem limitações da simulação de escoamentos que apresentem separação da camada limite e em superfícies curvas. Para corrigir esta deficiência, o modelo RNG k-ε permite rastrear as menores escalas de turbulência junto com as demais escalas. O modelo SST tem merecido maior atenção recentemente por sua maior precisão para prever o comportamento do escoamento em regiões com gradientes de pressão adversos, tais como, por exemplo, nas regiões com descolamento do escoamento em perfis aerodinâmicos e palhetas ou perfis para turbo máquinas..

Além disso, entre os modelos de combustão aplicados, podem ser destacados: EDM ("Eddy Dissipation Model"), FM ("Flamelet Model") e FRCM ("Finite Rate Chemistry Model"). Enquanto o EDM é aplicado ao caso de chamas formadas por pré-mistura entre combustível e oxidante fora da zona de combustão, o FM é utilizado para caracterizar as chamas do tipo difusiva ou não pré misturada, onde a mistura do combustível e oxidante ocorre dentro da zona de combustão. O modelo FRCM pode ser aplicado para ambos os tipos

de chama, desde que sejam conhecidas as taxas de reação de todos as espécies químicas da mistura ignitável ar e combustível.

O uso do CFD pelos fabricantes de turbinas a gás tem merecido maior atenção progressivamente, como citado em Lai *et al* (2002) que contribuem para a Honeywell Engines e a Systems & Services, respectivamente, no desenvolvimento de um sistema especialista (um programa capax de vincular os resultados do CFD com as dimensões definidas em CAD, a fim de otimizar o projeto), conhecido como ACT ("Advanced Combustion Tool"), cuja análise agrega diferentes geometrias de câmaras de combustão.

Neste contexto, é importante a implementação de procedimentos de simulação que utilizem os recursos computacionais e métodos numéricos existentes com a finalidade de determinar as principais variáveis que afetam o complexo fenômeno da combustão, principalemente sobre o enfoque de verificar potenciais modificações do projeto original da câmra, quando operada com diferentes combustíveis. Uma referência para este estudo de caso é o projeto Floxcom de uma câmara de combustão de baixa emissão de NOx realizado por um grupo internacional formado por Israel Institute of Technology, Imperial College of Science Technology & Medicine (ICSTM), CINAR Ltd. (CINAR), Instituto Superior Técnico de Portugal (ISTP), Institute of Fundamental Technological Research (IPPT-PAN), ANSALDO Ricerche Srl, B&B AGEMA Gmbh (B&B_AGEMA), Rheinish-Westfaelische Technische Hochschule Aachen (RWTH), e Caldaie Italy (CCA-I), em 2003.

Desta forma, no presente trabalho de tese de doutorado aceitou-se o desafio de propor uma organização prática dos modelos de escoamento, de combustão e de transferência de calor por radiação desenvolvidos para o Cálculo da Dinâmica de Fluidos num formato de procedimento, e sua aplicação num estudo de caso com a finalidade de caracterizar o comportamento termo-aerodinâmico de uma câmara de combustão de micro turbinas a gás para operar com diferentes combustiveis.

Para isso, a modelagem é validada, seja no aspecto aerodinâmico, seja no aspecto termodinâmico. A primeira validação se efetua sobre um modelo de câmara de combustão anular de baixa emissão do projeto Floxcom da Israel Instute of Technology *et al* (2003), cujos dados experimentais sobre as distribuições de velocidade e pressão no seu interior são conhecidas. A segunda validação se efetua em dois modelos geométricos, a fim de verificar a precisão dos modelos de combustão adotados no presente trabalho: o primeiro modelo geométrico consiste em um Queimador FLOX desenvolvido por Wunning (1996), onde são comparados os dados de temperatura obtidos numérica e experimentalmente, enquanto o segundo modelo geométrico consiste num experimento relizado pela International Flame

Research Foundation em uma fornalha HITAC (“High Temperature Air Combustion”), segundo Weber *et al* (1999), onde são comparados os dados de temperatura.

Após a validação, realiza-se uma análise aerodinâmica e termo - aerodinâmica de uma câmara de combustão do tipo anular de uma micro turbina a gás da Solar Turbines instrumentada existente no Laboratório de Sistemas Térmicos no NEST / UNIFEI, que opera com diesel e/ou querosene, a fim de obter as distribuições de velocidade, pressão e temperatura, os quais são parâmetros úteis para realizar a comparação de deferentes modelos de escoamentos e de combustão, bem como, podem atuar como parâmetros para avaliar as potenciais modificações do projeto original da câmara quando operada com combustível alternativo, neste caso, o gás natural em condições nominais e em regime permanente. A Figura 1.3 mostra esta micro turbina a gás instrumentada no laboratório do NEST.

Figura 1. 3 Micro turbina a gás instrumentada do laboratório do NEST adotada para a realização das simulações

Neste trabalho, dentre os parâmetros da câmara de combustão que podem ser utilizados para caracterizar o seu funcionamento, podem ser destacados:

a) distribuição de temperatura na exaustão;

b) distribuição da temperatura ao longo de uma seção longitudinal da câmara, a fim de identificar a posição e o alcance da chama;

c) levantamento dos vetores velocidade para indicar o posicionamento da recirculação ao longo de uma seção longitudinal da câmara, a qual pode ser afetada pelos orifícios laterais do tubo de chama, que influenciam também a estabilidade e a posição da chama, bem como a diluição dos gases quentes produtos da combustão;

d) determinação das distribuições de pressão ao longo da mesma seção longitudinal para calcular a perda de carga localizada; e

e) distribuição da temperatura na superfície do tubo de chama.

1.2 Objetivo do Trabalho

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver uma metodologia para o projeto e estudo preliminar do comportamento termo aerodinâmico tridimensional de câmara de combustão de micro turbina a gás operando em regime permanente e a carga nominal, com a aplicação do Cálculo da Dinâmica de Fluidos para o combustível gás natural.

Os objetivos específicos são:

1°. Estabelecer os principais parâmetros físicos (velocidade, pressão e temperatura) que permitem caracterizar o comportamento termo-aerodinâmico de um modelo de câmara de combustão, que podem ser associados com a geometria;

2°. Modelagem numérica usando cálculo CFD da aerodinâmica a fim de caracterizar as perdas de carga a partir do levantamento dos campos de velocidade e pressão, e a simulação da termo-aerodinâmica, a fim de caracterizar o comportamento da chama a partir do levantamento do campo de temperatura, envolvendo reações químicas até 2 passos usando como combustível o gás natural; e

3°. Desenvolver uma metodologia que funcione como ferramenta de engenharia complementar em auxílio ao projeto de câmaras de combustão para micro turbinas a gás.

1.3 Justificativas do Trabalho

Atualmente, a necessidade de desenvolver equipamentos para micro turbinas a gás com melhor eficiência norteia também a necessidade para implementar câmaras de combustão com menor emissão de poluentes, utilizando diversos combustíveis.

O desafio se concentra no conhecimento do complexo fenômeno da combustão, que envolve muitas variáveis físico – químicas, cuja determinação através de testes experimentais é onerosa.

Contudo, diversas pesquisas têm sido realizadas e demonstrado que a caracterização do comportamento termo aerodinâmico destes equipamentos tem encontrado motivação no campo da simulação numérica, devido à aplicação de métodos numéricos mais robustos e precisos associados à computadores mais rápidos, que têm permitido obter respostas a diversos tipos de problemas correlatos as necessidades de adequação das câmaras de combustão para operar com diferentes combustíveis, utilizando dados que são impraticáveis experimentalmente, tais como a visualização tridimensional do escoamento dos gases quentes no interior de turbinas a gás e micro turbinas a gás.

Neste contexto, o presente trabalho contribui pela implementação de uma metodologia para avaliação de projetos e estudo termo aerodinâmico tridimensional de câmaras de combustão do tipo anular para turbinas a gás e micro turbinas a gás em regime permanente e em condições nominais de operação, utilizando como combustível o gás natural.

Para isso, desenvolve-se um procedimento prático para utilização de diferentes modelos matemáticos na simulação de escoamentos, da combustão e da transferência de calor por convecção e radiação com o uso da Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), a fim de caracterizar o comportamento termo aerodinâmico com a determinação das principais variáveis que afetam o complexo fenômeno da combustão, tais como: a velocidade e pressão do escoamento, e a temperatura da chama.

O CFD adotado no presente trabalho utiliza o Método de Volumes Finitos, que emprega um algoritmo de pressão-velocidade tipo Simple, o qual acopla e resolve as equações de Navier Stokes discretizadas, permitindo obter num mesmo passo de tempo todas as variáveis termo aerodinâmicas junto com o cálculo do termo fonte na equação de espécies (isto é, reação química), Arioli e Koch (2003).

Desta forma, criam-se subsídios de projeto para futuras configurações e suas eficiências, utilizando combustíveis com várias formas de hidrocarbonetos, tanto no aspecto térmico, quanto ambiental das emissões, bem como verificar também que parâmetros geométricos e operacionais podem ser modificados a fim de otimizar o projeto original da câmara de combustão.

1.4 Contéudo do Trabalho

As atividades realizadas no presente trabalho compreendem o capítulo 1, que apresenta uma revisão bibliográfica sobre câmaras de combustão para micro turbinas a gás e Dinâmica de Fluídos Computacional. Nesta revisão, busca-se identificar quais são os parâmetros que melhor caracterizem o funcionamento da câmara de combustão e os modelos matemáticos mais robustos e precisos para a simulação termo aerodinâmica, bem como a atual importância deste equipamento para o setor de geração distribuída de energia.

O capítulo 2 fornece uma idéia geral sobre as micro turbinas a gás, com sua cronologia, caracterização funcional, comparação com outros equipamentos alternativos para suprimento de energia, limitações, dando enfoque para um dos seus principais componentes, a câmara de combustão, fornecendo informações sobre sua classificação, limitações operacionais e principio de funcionamento, apresentado uma caracterização do seu processo

de combustão e emissões. Ao final deste capítulo, apresentam-se perspectivas tecnológicas sobre as potenciais modificações necessárias para aumentar sua eficiência e diminuir suas emissões.

No capítulo 3, apresenta-se a metodologia da Dinâmica de Fluidos Computacional utilizando o software ANSYS CFX v.5.7® na modelagem das câmaras de combustão, suas principais etapas, seus modelos de escoamentos turbulentos, de combustão, de transferência de calor por radiação, bem como os critérios usados no equacionamento e simplificação dos problemas físicos envolvidos e o estabelecimento das condições de contorno e de convergência.

No capítulo 4, mostra-se a modelagem de uma câmara de combustão, apresentando os modelos de escoamentos turbulentos, de combustão, de transferência de calor por radiação, seguindo os passos definidos pelo procedimento proposto pelo anexo D.

Além disso, também se apresentam dois softwares auxiliares, a destacar: GateCycle e o Gaseq. O primeiro é utilizado na simulação do ciclo térmico da micro turbina a gás com a finalidade de estabelecer os parâmetros de operação da câmara de combustão em regime permanente e em carga nominal, tanto na entrada, quanto na saída de cada componente. O segundo software pode ser utilizado como ferramenta para a obtenção das concentrações dos reagentes e produtos das reações químicas da combustão, cuja principal função é fornecer dados indicativos sobre as emissões, para diferentes combustíveis e a temperatura adiabática da chama.

No capítulo 5, apresentam-se os resultados obtidos das simulações numéricas realizadas em três etapas.

A primeira aborda o processo de validação aerodinâmica de modelos de escoamentos turbulentos utilizados pelo CFD, apresentando um caso de uma câmara de combustão de baixa emissão de NOx referente ao projeto Floxcom da Israel Isntitute of Technology *et al* (2003), comparando dados sobre pressões e velocidades do escoamento.

A segunda etapa contempla a validação termo-aerodinâmica dos modelos de combustão em dois modelos geométricos: o primeiro, um Queimador FLOX desenvolvido por Wunning (1996), onde são comparados os dados de temperatura obtidos de forma numérica e experimentalmente, enquanto o segundo modelo geométrico consiste num experimento relizado pela International Flame Research Foundation em uma fornalha HITAC (“High Temperature Air Combustion”), segundo Weber *et al* (1999), onde são comparados os dados de temperatura.

A terceira etapa apresenta o estudo termo-aerodinâmico de uma câmara de combustão do tipo anular da fabricante Solar Turbines, apresentando dois casos: a) estudo aerodinâmico para se verificar o tempo de residência do escoamento dentro da câmara e visualizar o campo de pressão e velocidade para caracterizar as perdas de carga; e b) estudo termo-aerodinâmico para visualizar os campos de temperatura, pressão e velocidade para caracterizar o comportamento da chama.

Finalmente, no capítulo 6, se apresentam as conclusões e as recomendações propostas para futuros trabalhos em CFD.

Além disso, no anexo A, mostram-se algumas fotos da micro turbina a gás desmontada, onde se identificam seus principais componentes. No anexo B, apresentam-se as telas do programa GASEQ com as informações sobre a simulação da reação de combustão do gás natural. No anexo C, apresenta-se o procedimento proposto por este trabalho, utilizando o programa CFX para a simulação tridimensional de câmaras de combustão em CFD. Nos anexos D e E são apresentados, respectivamente, os principais conceitos e equacionamentos sobre o modelo de escoamento turbulento RNG k-ε e o modelo de combustão "Eddy Dissipation Model" (EDM) ou "Eddy Break Up" (EBU) aplicados neste trabalho. No Anexo F, são apresentadas as variáveis físicas e as equações diferenciais num formato generalizado, as quais podem ser empregadas para o estudo de processos de combustão e, no Anexo G, são apresentados os artigos elaborados para congressos e publicações indexadas que ajudaram para o desenvolvimento deste trabalho.

1.5 Revisão Bibliográfica

O complexo fenômeno da combustão vem sendo estudado há muito tempo. Existem evidências que foram encontradas nos trabalhos desenvolvidos por Leonardo da Vinci (1452-1519), onde o mesmo relata suas observações sobre a função do oxigênio na chama. Contudo, o primeiro químico que provou através de medições que o oxigênio é essencial para a combustão foi Joseph Prestly (1733-1764) e a formulação das equações químicas da combustão foram definidas por Antonie Laurent Lavoisier (1743-1794), cuja teoria das reações químicas é aceita até os dias atuais.

A aplicação comercial das câmaras de combustão para turbinas a gás pela indústria aeronáutica começou no final da década de 1930 com a 2° Mundial (1939-1945).

Considerando a importância que as micro turbinas a gás têm representado para o setor elétrico quanto à geração distribuída, apresenta-se a seguir um enfoque sobre a participação

deste equipamento em relação às demais formas para obtenção de energia, destacando os trabalhos que contribuíram para o desenvolvimento das micro turbinas e das câmaras de combustão, dentro do aspecto construtivo e operacional. Apresentam-se, também, os trabalhos que estudam o processo de combustão e o comportamento da chama, bem como os trabalhos que desenvolveram e/ou aplicaram modelos numéricos com satisfatória precisão para simular o comportamento do escoamento e da chama no interior de câmaras de combustão:

Fontes Alternativas de Energia e Combustíveis Renováveis

Raivanshi e Goswam (1986) detalham o processo de extração e aplicação do gás de biomassa na geração de calor e potência, fornecendo informações sobre suas principais características físicas, tais como, poder calorífico, composição química, peso, combustão e emissão de poluentes de forma comparativa com outros tipos de combustíveis. Realizam um trabalho experimental sobre comportamento da chama.

Appleby (1995) realiza um estudo comparativo entre os veículos convencionais de combustão interna com os veículos elétricos movidos à bateria química, as quais são feitas com um catalítico à base de platina. Estes veículos elétricos podem ter autonomia de até 400 [km]. Para a sua fabricação, são gastos normalmente 0,25 [g/kW]. Mostra-se, também, um breve histórico sobre a concepção das baterias químicas, bem como a aplicação da tecnologia híbrida entre bateria química e células a combustível.

Bove e Lunghi (2006) apresentam um trabalho sobre as células a combustível, mostrando sua viabilidade técnica e econômica frente às outras fontes alternativas de energia, bem como seu principio de funcionamento e tecnologias atualmente disponíveis que melhoram sua performance também no aspecto ambiental.

Ghoneim (2006) explora as principais características construtitivas e de operacionalidade de uma central de bombeamento acionada por energia solar através de painéis constituídos por célulcas fotovoltaicas. Realiza diversas experiências visando verificar potenciais melhorias em sua performance. Esta central localiza-se no College of Technological Studies em Shuwaikh, no Kuwait. É desenvolvida também uma ferramenta computacional com a finalidade de monitorar a operação e mostrar potenciais melhorias no funcionamento deste equipamento submetido a diversas condições de isolação, ao longo de um período de um ano.

Ugursal *et al* (2006) também realiza estudo sobre as células a combustível aplicadas aos sistemas micro-cogerativos em residências, hospitais e hotéis que necessitam de potência e calor até, aproximadamente, 30 [kW]. Os ciclos cogerativos analisados tratam-se da união de células a combustível com micro turbinas a gás e/ou motores de combustão interna.

Características quanto à performance, benifícios ambientais, e custo de instalação e operação são também avaliados.

Micro-Turbinas a Gás

Environment Protection Agency (2002) desenvolve um estudo sobre a caracterização das micro turbinas a gás no contexto de energia alternativa, apresentando suas principais características técnicas quanto aos seus componentes, operação, aplicações e custos.

Antonio et al (2003) ressalta as micro turbinas a gás como uma das alternativas de energia economicamente viáveis, conforme o novo contexto energético de desregulamentação, privatização, maior preocupação ambiental e restrições da oferta de energia obtida pelos meios convencionais no Brasil, bem como um estudo de caso de uma unidade instalada no Nordeste operando com gás natural num ciclo cogerativo.

Pavlas *et al* (2005) conduz o estudo de melhoria do projeto e aumento de potência de uma micro turbina a gás, com a adequação de um câmara de combustão para operar com diferentes combustíveis (gás natural e gás de biomassa). Este estudo é parte integrante de um projeto de pesquisa visando otimizar o desempenho de ciclos combinados aplicados na industria, onde diferentes arranjos dos componrnetes de micro turbinas a gás são testados (compressror, câmara de combustão e turbina e gás). Conclui que o uso do ciclo combinado de calor e potência, usando gás de biomassa é a melhor opção. Deste estudo, desenvolve uma metodologia sobre "repotenciação de micro turbinas a gás" apresentando esquemas alternativos para outros casos, tais como: ciclos cogerativos à gás natural; ciclo de produção de calor usando biomassa; ciclo de produção de eletricidade usando biomassa; e ciclo combinado usando biomassa. A vantagem destas alternativas é não ser necessário trocar o compressor ou a turbina.

Poullikkas (2006) realiza um estudo sobre custo e benefício de tecnologias de geração distribuída para sistemas isolados, com destaque para as micro turbinas a gás e motores de combustão interna. Mostra também que, dependendo do mercado consumidor regional, o custo das micro turbinas a gás ainda é maior do que dos motores de combustão interna, porém, que este quadro está mudando mundialmente.

Câmaras de Combustão

Bicen *et al* (1988) realizam testes experimentais para avaliar potenciais modificações no projeto de uma câmara de combustão do tipo anular de uma miicro turbina a gás de helecoptero, a fim de adequar seu funcionamento utilizando um combustivel alternativo, neste caso, o gás natural com razões ar / combustível variando de 29:1 a 37:1. Mostra-se que a

ancoragem da chama neste tipo de câmara de combustão é significativamente mais afetada pela localização dos orifícios primários do que em relação ao processo termo-químico, porque afetam a geração e a migração de vórtices a partir do tubo de chama até a zona de combustão.

Stickles *et al* (1993) descrevem os resultados dos ensaios realizados pelo Centro de Propulsão Aéreo e Naval dos EUA em 27 tipos diferentes de injetores. Determina os principais fatores que afetam diretamente o controle das emissões de poluentes para câmaras de combustão que utizem combustíveis líquidos. Este estudo convergiu para a obtenção de um United States Patent 6543235 em 2003.

Environment Protection Agency (1993) define os limites aceitáveis de emissão de poluentes, conforme a potência instalada e o tipo de combustível, bem como estabelece as três regras básicas para controle de emissões de poluentes: Injeção de água e/ou vapor na exaustão das câmaras para emissões médias entre 25 (ppmv) a 45 (ppmv) para o gás natural e entre 42 (ppmv) a 75 (ppmv) para os óleos combustíveis; Mudança no projeto das câmaras de combustão para operar com pré-mistura ou combustão em multi estágios para emissões médias entre 9 (ppmv) a 25 (ppmv) para o gás natural e entre 25 (ppmv) a 42 (ppmv) para os óleos combustíveis; e redução catalítica com a injeção de amônia (NH_3) para emissões médias entre 25 (ppmv) a 42 (ppmv) para o gás natural e, no mínimo, 18 (ppmv) para os óleos combustíveis.

Allen (1998) expõe os principais procedimentos para o projeto de tubos de chama de baixa emissão de NOx e as condições para a estabilização da chama, bem como a dependência da combustão quanto ao estado físico do combustível. Mostra-se uma técnica que permite controlar a mistura ignitável a fim de evitar os picos de temperatura da chama, os quais estão diretamente relacionados com a formação de NOx térmico.

Wahabayashi (2002) realiza um estudo sobre as câmaras de baixa emissão do tipo DLN (Dry Low NOx). Mostra que a performance destas câmaras de combustão pode ser melhorada quando usam gás natural como combustível, uma vez que o mesmo já apresenta baixas emissões.

Israel Institute of Technology (2003) é um dos grupos internacionais reunidos (Imperial College of Science Technology & Medicine (ICSTM), CINAR Ltd. (CINAR), Instituto Superior Técnico de Portugal (ISTP), Institute of Fundamental Technological Research (IPPT-PAN), ANSALDO Ricerche Srl, B&B AGEMA Gmbh (B&B_AGEMA), Rheinish-Westfaelische Technische Hochschule Aachen (RWTH), e Caldaie Italy (CCA-I)) para desenvolver um projeto de uma câmara de combustão de baixa emissão, conhecida como Floxcom, a partir da modificação do projeto original de uma câmara de combustão do tipo

anular para turbinas a gás. Este estudo abrange a realização de uma bateria de testes experimentais para a validação da análise teórica e numérica (CFD), onde se efetua a visualização das distribuições de pressão e temperatura para caracterizar as perdas de carga e a posição da chama. São realizadas validações tanto sob o aspecto aerodinâmico e termo-aerodinamico, comparando distribuições de velocidade e temperatura. Os estudos revelam que a novo projeto de câmara de combustão pode apresentar estabilidade da chama, seja para uma maior escala de razão de equivalência ar / combustível, seja para maior escala de pressões, o que pode permite a obtenção de menores emissões de NOx.

Combustão

Lefebvre e Reid (1966) realizam um estudo sobre a influência do escoamento turbulento sobre o comportamento de chama produzida pela combustão de propano. Realiza-se o levantamento dos campos de velocidade e de temperatura, para caracterizar a propagação da chama. Verifica-se que a turbulência afeta o alcance da chama, dependendo da velocidade inicial do escoamento e da temperatura inicial da mistura ar /combustível no injetor.

Fenimore *et al* (1987) realizam estudos experimentais e numéricos sobre o mecanismo de formação do NOx em chamas difusivas produzidas pela combustão de diversos combustíveis gasosos ($CO/H_2/N_2$, $CO/H_2/CO_2$, e $CO/H_2/Ar$) injetados em uma câmara de combustão com jato turbulento à presssão atmosférica. Identifica-se que nas zonas de maior temperatura, forma-se a maior parte do NOx, cuja taxa de formação diminui de 2,5 para 1,4 se a pressão dos jatos das misturas no injetor aumentarem de 1 [atm] para 10 [atm], respectivamente.

Smith *et al* (1992) realizam um extenso trabalho experimental para a determinação da estrutura de chamas não pré-misturadas com o levantamento da temperatura da chama para diferentes combustíveis.

Dupont e Williams (1998) realizam estudos experimentais em chamas verticais para analisar as taxas de produção de NOx. A razão de equivalência (inverso da razão ar / combustível) adotada é igual a 1,9. Verifica-se que a taxa de produção do NOx é alta nas regiões com baixa temperatura (da ordem de 1900 [K]) e baixa concentração de OH, localizadas no meio de chamas pré-misturadas e em regiões de alta temperatura (da ordem de 2200 [K]) e alta concentração de OH localizadas na parte externa de chamas não pré-misturadas. Além disso, as maiores taxas de produção de NO está na região externa da chama pré-mistura.

Borbely *et al* (2001) realizam um estudo termodinâmico do processo de combustão para diversos combustíveis, bem como fornecem dados empíricos das propriedades físicas dos combustíveis, segundo a temperatura da chama.

Tomczak *et al* (2002) descrevem o comportamento da chama em câmara de combustão do tipo tubular operando com combustível formado por diferentes concentrações de hidrogênio e metano. Constata-se que o durante o aumento gradativo de hidrogênio na mistura ignitável, acarreta: diminuição do alcance da chama; aumento da temperatura da chama; aumento das emissões de NOx até 3,5 vezes maiores do que usando somente gás metano; e aumento das emissões de CO.

Wakabayashi *et al* (2002) desenvolvem um estudo sobre os mecanismos de controle das emissões sobre o projeto de uma câmara de combustão do tipo tubular, utilizando diferentes combustíveis.

Cozzi e Coghe (2006) analisam os efeitos do hidrogênio em uma chama produzida pela combustão do gás natural em condições não pré-misturada em uma câmara de combustão do tipo tubular. As concentrações do hidrogênio variam de 0% a 100% em volume e são realizadas medições nas concentrações de NOx e CO, bem como o levantamento do campo de temperatura. Este estudo permite constatar que durante o aumento da concentração do hidrogênio: a) uma chama mais curta e de cor tendendo para azul; b) um jato de combustível com maior penetração na zona de queima (a velocidade do combustível tende a ser maior do que a velocidade da chama); c) um acréscimo das emissões de NOx e CO para concentrações de hidrogênio até 80% devido à maior velocidade de queima (função da razão velocidade do escoamento pela velocidade da chama) na câmara, operando em condições não-estequiométricas; e d) aumento da estabilidade da chama nas condições limites de operação da câmara.

Ilbas *et al* (2006) analisam os efeitos das misturas ar-hidrogênio e ar-hidrogênio-metano no projeto e na performance das câmaras de combustão. Consideram-se chamas com escoamento laminar produzidas para diferentes razões ar / combustível variando desde 100 [%] de hidrogênio até 100 [%] de metano, em temperatura ambiente e razões de equivalência variando entre 0,8 a 3,2. Este estudo verifica a influência da composição química na natureza e estrutura da chama, bem como constata que diminuindo o percentual de hidrogênio nas misturas ar-hidrogênio-metano, pode ocorrer um aumento na velocidade da chama e aumenta o intervalo entre os limites de flamabilidade. O teste experimental revela que é possível elaborar um combustível alternativo competitivo economicamente, usando-se misturas hidrogênio-metano com 30 [%] de hidrogênio e 70 [%] de metano.

Modelagem Computacional

Svehla e McBride (1973) desenvolvem um algoritmo conhecido como **Método Lewis NASA** que consiste de um programa interativo capaz de realizar a análise termo química para algumas reações de combustão a partir do levantamento do equilíbrio termodinâmico e do equilíbrio de massas das espécies químicas. Serviu de base para a concepção dos programas para análise química de reações CHEMKIN® e GASEQ®.

Lee *et al* (1990) determinam os campos de velocidade e temperatura em um modelo genérico de câmara de combustão em função do tipo de malha, da quantidade de elementos, do modelo de combustão FRCM ("Fast Rate Chemistry Model") com Modelo PDF ("Probability Density Function") para as emissões de NOx e FM ("Flamelet Model"), e dos modelos de turbulência k-ε, RNG k-ε e Reynolds Stress Model (RSM), aplicando o Método de Elementos Finitos.

Siegel e Howell (1992) realizam a simulação da transferência de calor por radiação nos processos de combustão para câmaras de combustão para turbinas a gás. Apresentam o modelo PDF para simular o mecanismo de formação de NOx, bem como propõem equações semi-empíricas, seguindo os conceitos sobre os mecanismos de formação do NOx apresentados por Lefebvre (1983), para estimar as concentrações de NOx em diferentes regiões das câmaras de combustão e estimar o tempo de residência química.

Fuller e Smith (1994) determinam o campo de temperaturas e velocidades em duas fases: a primeira contempla o escoamento da chama em um difusor do tipo "Spray" e a segunda fase consiste em uma câmara de combustão tubular. Utiliza-se modelo de radiação Discrete Transfer, modelo de combustão EDM ("Eddy Dissipation Model"), modelo de escoamento turbulento RNG k-ε e o modelo de emissão de NOx de Zeldovich. A discretização é obtida utilizando-se o Método de Volumes Finitos.

Hamer e Roby (1997) aplicam o software STAR CD CFD com modelo de combustão EDM ("Eddy Dissipation Model"), considerando reações com 5 etapas, na simulação do processo de combustão do gás metano em um modelo 3D de uma câmara de combustão tubular, descrevendo os campos de temperatura e de emissão de NOx e COy na exaustão. Este estudo representa um dos primeiros trabalhos focando os efeitos tridimensionais no escoamento ao redor de chamas.

Sparlat et al (1997) desenvolvem um trabalho sobre as técnicas de solução das equações de transporte de massa e calor no formato diferencial parcial reunindo em uma única metodologia as características das técnicas RANS ("Reynolds Averaged Navier Stokes") e

LES (“Large Eddy Simulation”). Esta metodologia, que utiliza uma técnica híbrida entre RANS e LES, é conhecida hoje por DES (“Detached Eddy Simulation”).

Teodora *et al* (1998) efetuam uma investigação experimental sobre o efeito do tempo de residência do escoamento na formação de NOx durante a combustão do metano com chama pré-misturada, com temperatura de chama de 1803 [K] em um reator com injetor de jato rotativo de alta pressão. Obteve como resultados: a) quanto menor o tempo de residência do escoamento, maior a formação de NOx; e b) o tempo de residência do escoamento praticamente não afeta a emissão de CO. Para este tipo de combustão, o tempo de residência pode variar entre 5 [ms] a 40 [ms] em escoamento turbulento.

Yadigaroglu *et al* (1998) realizam um estudo aerodinâmico, aplicando três modelos de turbulência: k-ε, RNG k-ε (“Renormalization for k-ε“) e RSM (“Reynolds Stress Model”). Descrevem a influência das perdas de carga na emissão dos gases poluentes, concluindo que o tempo de residência dos gases pode ser acrescido com o aumento da perda de carga. Realizam a simulação do escoamento de uma câmara tubular dotada de um injetor, a qual é discretizada por uma malha com 7320 elementos hexaédricos, bem como demonstram que os modelos de turbulência RNG k-ε e RSM apresentam precisão satisfatória, quando comparados com dados experimentais. Contudo, não aplicam o modelo SST (“Shear Stress Model”).

Melick e Kersch (1999) também realizam um estudo técnico e econômico sobre a viabilidade para adaptar câmaras de combustão para operar com diferentes combustíveis. Utilizam câmaras de combustão tubular para as turbinas a gás fabricadas pela Environment and Energy Research Corporation (EERC) nos EUA. Mostram que é possível reduzir as emissões de poluentes com a melhoria na performance destes equipamentos.

Gosselin *et al* (2000) aplicam o cálculo CFD em um modelo 3D de uma câmara de combustão do tipo Cilíndrica ou Tubular GHOST, fabricada pela Lucas Gas Turbines Company, USA, com a finalidade de comparar os campos de temperatura com os resultados experimentais. O modelo 3D adotado contempla apenas um setor seccionado por um ângulo de 60° ou 1 / 6 do equipamento, porque existem 6 injetores distribuídos simetricamente, admitindo que o processo de combustão é simétrico, livre dos efeitos da convecção, usando Modelo PDF (“Probability Density Factor”), que consiste em modelo estatístico apto para simular chamas com escoamento turbulento.

Louis *et al* (2001) realizam uma simulação em CFD para um modelo, com a finalidade para prever as condições não adiabáticas de uma chama não pré-misturada turbulenta em uma câmara de combustão cilíndrica resfriada a ar para um modelo de turbina a gás com potência de 16 [kW]. O fluido de trabalho trata-se de um gás combustível constituído por 40 [%] de

CO, 40 [%] de H_2 e 20 [%] de N_2 com poder calorífico inferior de 11,9 [MJ/kg]. São testados dois modelos de turbulência: k-ε e RSM. Desenvolve-se um código para simular a combustão não adiabática conhecida como FIRS, que é embutido no código CFD, e consiste numa modificação do código interno usado para definir a variável de acompanhamento da reação durante a combustão, conhecida como FRS. Adota-se o modelo de emissão NOx Térmico de Zeldovich. Constata-se que o modelo FIRS apresenta satisfatória precisão, quando comparado aos resultados experimentais sobre as emissões de NO, CO, CO_2, O_2, bem como os campos de temperatura, considerando as perdas de carga no sistema.

Ximming (2001) implementa um estudo sobre modelos de reação com menor número de etapas sobre a combustão de hidrocarbonetos. Analisa seus efeitos sobre a estabilidade da chama e emissões, comparando o resultado numérico com informações experimentais.

Gurgel *et al* (2002) aplicam CFD no estudo sobre o projeto e o desempenho de uma câmara de combustão do tipo tubular para micro turbina a gás, mostrando resultados satisfatórios, quanto à precisão sobre a temperatura, a velocidade e a pressão para caracterizar a chama e as perdas de carga, respectivamente. A posição da chama é afetada pelos "Swirlers".

Gurgel *et al* (2002) realizam uma modelagem numérica em câmara de combustão do tipo tubular para micro turbina a gás, identificando que o tempo de residência aumenta com a ação do "swirler".

Lai *et al* (2002) apresentam resultados preliminares do pacote comercial ACT desenvolvido pela Honeywell Engines e Systems & Services no estudo de otimização de câmaras de combustão dos tipos tubular, anular e turbo-anular. As principais características do ACT são: a) Redução no tempo de geração da geometria e da malha; b) Eliminação de configurações complexas para a definição do domínio físico, condições de contorno e de convergência, apresentando uma boa biblioteca de cálculos; c) Facilidade de uso; e d) Boa precisão dos resultados.

Lyckama *et al* (2002) apresentam um estudo preliminar sobre a influência da mistura ignitável na eficiência e na estabilidade da chama em uma câmara de combustão usando inicialmente gás natural e adaptada para admitir quantidades progressivas do gás de biomassa. A simulação é executada em CFD com o detalhamento das reações químicas pelo software GRI 3.0. O modelo de combustão usado é FRCM ("Finite Rate Combustion Model"), conhecidas as taxas de reação das espécies.

Nickolaus *et al* (2002) realizam a simulação termo-aerodinâmica de modelos 2D e 3D de um setor com ângulo de 24° de uma câmara de combustão do tipo tubular dotada de um

injetor de combustível do tipo Airblast, utilizando malha hexaédrica com 370000 elementos. Realizam a validação da malha e do modelo de escoamento turbulento RNG k-ε, do modelo de combustão EDM ("Eddy Dissipation Model"), modelo de radiação Discrete Transfer Model, comparando a temperatura da parede do tubo de chama com dados experimentais, com precisão satisfatória de 5 [%] de desvio.

Arioli e Koch (2003) desenvolvem um trabalho de modelagem da combustão que utiliza a Equação Kuramoto-Sivashinski para calcular o termo fonte na equação de espécies (isto é, reação química).

Davidson (2003) desenvolve um extenso trabalho sobre os principais modelos de turbulência utilizados pelo CFD, apresentando o equacionamento básico para a dedução de alguns modelos de turbulência, com destaque para k-ε, RNG k-ε, Modelo de Tensões de Reynolds – RSM e o Modelo SST k-ω ("Shear-Stress-Transport").

Rutland e Rao (2003) apresentam um estudo de caso sobre combustão do tipo pré-misturada com escoamento turbulento, aplicando o modelo de combustão FM. Este estudo contempla também o levantamento do tempo químico da reação para o gás metano.

Vandebroek *et al* (2003) exploram um modelo numérico baseado na cinética química, com a função de prever a temperatura de auto-ignição dos gases usados como combustíveis em câmaras de combustão do tipo tubular.

Cristina e Tuccilo (2004) apresentam um estudo comparativo de diferentes modelos de câmaras de combustão (tubular, tubular com pré-mistura, e anular) para diferentes condições para admissão do ar, aplicando os modelos de combustão EDM e FRCM. São obtidos os campos de emissão de poluentes e temperatura na exaustão, mostrando que a perda de carga é menor na Anular, onde a estabilidade da chama e o tempo de residência são afetados pelos orifícios de ar localizados nas superfícies laterais do tubo de chama.

Jiang e Campell (2004) apresentam uma análise comparativa quanto aos campos de velocidade, pressão e temperatura entre os modelos de combustão EDM com PDF e FRCM em uma câmara de combustão tubular para domínio 2-D e 3-D, usando o software FLUENT, com modelos de turbulência K-ε e RSM, e o modelo de emissão de NOx de Zeldovich. Os resultados obtidos numericamente são comparados com dados experimentais, onde os modelos de combustão EDM e PDF apresentam melhor precisão do que o FRCM.

Koutsenko *et al* (2004) aplicam o cálculo CFD na análise da combustão e o levantamento das emissões de NOx em um modelo de câmara tipo tubular, usando o ferramental do TASC Flow. Mostra que o cálculo CFD é um aliado no projeto otimizado

desta câmara, na medida que os resultados são obtidos mais rapidamente do que os dados experimentais.

Parente *et al* (2004) apresentam resultados preliminares no desenvolvimento de um projeto de câmara de combustão tubular para micro turbinas a gás comparando dados experimentais com dados obtidos pelo cálculo CFD, usando FLUENT com modelos de Turbulência k-e e RSM, modelos de combustão FRCM e EDM para a reação do metano até 2 etapas, cujo balanço químico para obtenção das concentrações das emissões de NOx são obtidos pelo CHEMKIN 3 para domínios 2-D e 3-D.

Enfim, a partir da revisão bibliográfica, verifica-se que a maioria dos artigos apresentados se aplicam ao estudo termo aerodinâmico de câmaras de combustão do tipo tubular para turbinas a gás, existindo poucas referências sobre a aplicação da Dinâmica de Fluidos Computacional aplicada para câmaras de combustão do tipo anular para micro turbinas a gás, cujas características operacionais são comparadas com outros equipamentos, que podem ser utilizados para a geração distribuída de energia térmica e elétrica no capítulo 2, tais como turbinas a gás, células de combustível, células solares, motores de combustão interna e baterias químicas.

Neste contexto, a metodologia necessária para o estudo do comportamento de câmaras de combustão do tipo anular para turbinas a gás é apresentada nos capítulos 3 e 4, a qual permite obter uma visualização tridimensional das distribuições de velocidade, pressão e temperatura, quando a câmara é operada com gás natural em regime permanente e carga nominal, como é apresentado no capítulo 5.

Capítulo 2

MICRO TURBINAS A GÁS

As micro turbinas a gás são unidades menores das turbinas a gás, capazes de produzir potências entre 15 e 350 [kW], baseando-se no mesmo princípio de funcionamento das turbinas a gás, todavia, apresentam características que as diferenciam das turbinas a gás maiores, os quais são apresentados neste capítulo.

Em vista de sua importância para a geração distribuída de energia elétrica, este capítulo encontra-se dividido em quatro partes. A primeira parte realiza: uma breve passagem pela história das micro turbinas a gás; efetua a caracterização operacional deste equipamento; apresenta seus principais fabricantes; mostra uma análise comparativa com outras unidades de produção de eletricidade; e efetua uma descrição dos seus componentes, com destaque para as câmaras de combustão.

A segunda parte descreve as principais característica das câmaras de combustão, selecionando uma delas para efetuar os cálculos termo-aerodinâmicos propostos neste trabalho.

Na terceira parte, efetua-se uma breve passagem sobre os principais conceitos envolvidos no complexo fenômeno da combustão, estrutura da chama, caracterização das reações e emissões.

E na quarta e última parte, expõe-se as principais perspectivas tecnológicas em voga em relação à performance das micro turbinas a gás e dos sistemas de controle / regulagem das emissões de poluentes.

2.1 Cronologia

A concepção das turbinas a gás não é recente e, de fato, remonta ao final do 18° século, quando John Barber patenteou a primeira turbina a gás em 1791, porém em nada resultou. Em 1892, Dr. J. F. Stolze desenvolveu uma turbina a ar quente, a qual foi fabricada em 1900, porém não produzia potência.

Em meados de 1903, um norueguês chamado Jens William Ægidius Elling (1861-1949) foi o pioneiro na concepção e construção da primeira turbina a gás no mundo capaz de produzir potência, conforme o conhecimento atual sobre seus componentes e aerodinâmica. Aquela micro turbina a gás era capaz de produzir uma potência equivalente a 8 (kW).

Em 1904, Jens William Ægidius Elling desenvolveu a primeira turbina a gás regenerativa com potência de 48 [kW].

Em 1906, Hans Holzawarth desenvolveu e completou a fabricação pela Brown Boveri em 1908 da primeira turbina a gás com câmara de combustão a volume constante. Porém, a primeira aplicação comercial das turbinas a gás deve-se a Charles Curtis (1860-1936) em 1914.

Não demorou muito tempo para esta fonte propulsora ganhar o interesse de investidores para a atuação comercial no setor aeronáutico em maior escala. Já em 1918, a General Electric Corporation iniciou a primeira linha de montagem de turbinas a gás de maior potência para a época (acima de 100 kW) para a geração de eletricidade.

A aplicação das turbinas a gás como fonte de alta potência somente ganhou maior interesse ao longo da década de 1930, com a turbina a gás patenteada por Frank Whittle (1907-1996) em 1937, aproveitando a concepção da turbina de Ægidius. A Figura 2.1 apresenta a turbina de Frank Whittle Modelo 1937 para turbojatos.

Em 1939, a primeira turbina a gás alemã foi concebida por Hans J. P. Ohain.

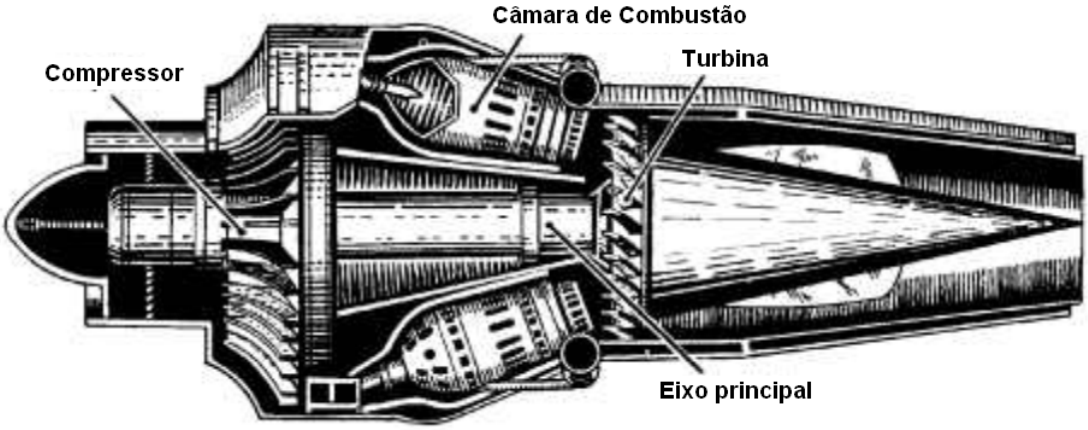


Figura 2. 1 –Turbina a Gás de Frank Whittle

O aproveitamento destas turbinas a gás propulsoras como fonte de energia elétrica começou somente na década de 1950, quando foi possível desenvolver a tecnologia necessária para modificar a localização da exaustão e acoplar um eixo solidário entre a turbina e um gerador elétrico.

Com isso, foi possível desenvolver máquinas compactas testando diferentes geometrias de câmaras de combustão (tubular ou cilíndrica; anular e turbo-anular.), que logo atraíram interesse, inclusive, da industria automobilística. Por exemplo, em 1954 a Chrysler Corporation iniciou projetos de micro turbinas para acionamento veicular, que mais tarde, na década de 1980, contribuiria para sua utilização em dois sistemas combinados: micro turbinas a gás com motores elétricos e micro turbinas a gás com células à combustível.

Em 1967, Kurt Schreckling iniciou a fabricação pela DARPA de micro turbinas a gás de potência inferior a 5 [kW] para acionamento de aeromodelos, como mostra a Figura 2.2. Na mesma época, micro turbinas a gás eram utilizadas como unidades auxiliares de potência em aviões, sendo conhecidaas como APU´s (Auxilary Power Unity").

Figura 2. 2 Micro Turbina a Gás desenvolvida para aeromodelos

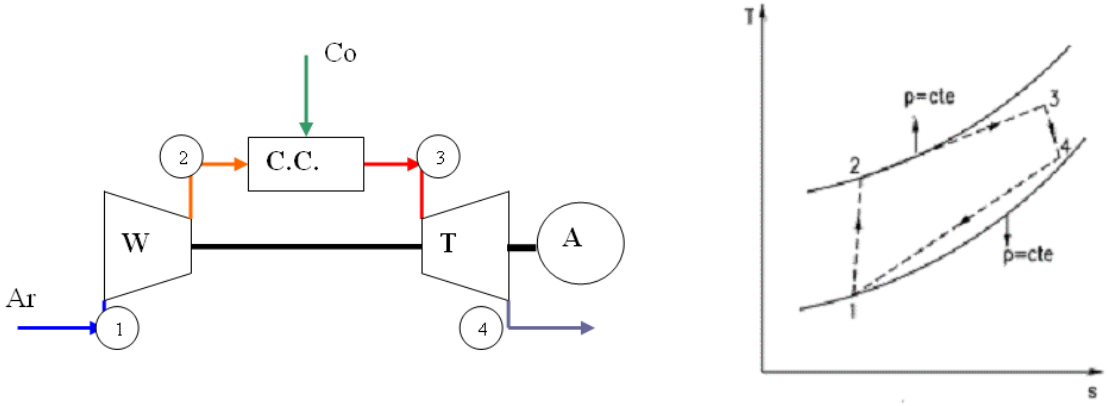
Somente na década de 1970, em decorrência da Crise do Petróleo de 1973, que se iniciou o interesse de aproveitar as micro turbinas a gás como uma fonte alternativa de energia.

Ao mesmo tempo, com o advento de políticas internacionais reguladoras das emissões de fontes combustíveis nas décadas de 1980 e 1990, o controle da emissão dos gases NOx, SOx, e CO pelas turbinas a gás como um todo, passou a ser mais um critério importante para o projeto das mesmas com potências quaisquer.

2.2 Caracterização Operacional

As micro turbinas a gás possuem o mesmo princípio básico de funcionamento das turbinas a gás de ciclo aberto (ciclo Brayton aberto), Cohen *et al* (1987). A Figura 2.3 mostra

o ciclo Brayton com seu respectivo diagrama **T-s**, sendo **W** o compressor, **C.C**. a câmara de combustão, **T** a turbina, **Co** o combustível e **A** o alternador.



(a) (b)

Figura 2. 3 Microtubina a gás: (a) Esquema básico do Ciclo Brayton; (b) Diagrama T-s real (com irreversibilidades e perdas de pressão)

O ar é comprimido pelo compressor, passando para a câmara de combustão, onde é misturado com o combustível e queimado sob pressão constante na câmara de combustão. Saindo da câmara de combustão, o gás quente resultante é direcionado para o rotor da turbina, onde é expandido, fornecendo potência de eixo para o acionamento do compressor e potência útil para o acionamento de um gerador elétrico ou outro equipamento.

As principais características das micro turbinas a gás são, Gurgel (2000) e EPA (2002):

a) Geração de potência elétrica entre 30 e 350 kW;

b) Baixíssimos índices de emissões (<10 [ppmv]) usando gás natural;

c) Custo total da instalação varia entre 1300,00 [US$/kW] a 2500,00 [US$/kW] para potência entre 350 [kW] e 30 [kW], respectivamente;

d) Eficiências térmicas de 25 a 30 [%];

e) Temperatura do gás na exaustão da turbina varia entre 450 [°C] e 650 [/C];

f) Velocidades de rotação de 40000 a 120000 [rpm];

g) Consumo de combustível varia entre 0,32 [kg/s] a 2,3 [kg/s];

h) Pressão do gás combustível requerido varia entre 3,7 [bar] a 9,3 [bar]; e

i) Compacticidade, apresentando volume aproximado de 0,34 [m^3].

A Figura 2.4 mostra a eficiência elétrica típica para micro turbinas a gás com recuperadores de calor como funções da razão de pressão do compressor, contemplando um intervalo de temperatura do gás na entrada da turbina entre 1116 [K] e 1228 [K], limitado

pelas propriedades físicas do material da turbina em condições nominais, conforme EPA (2002).

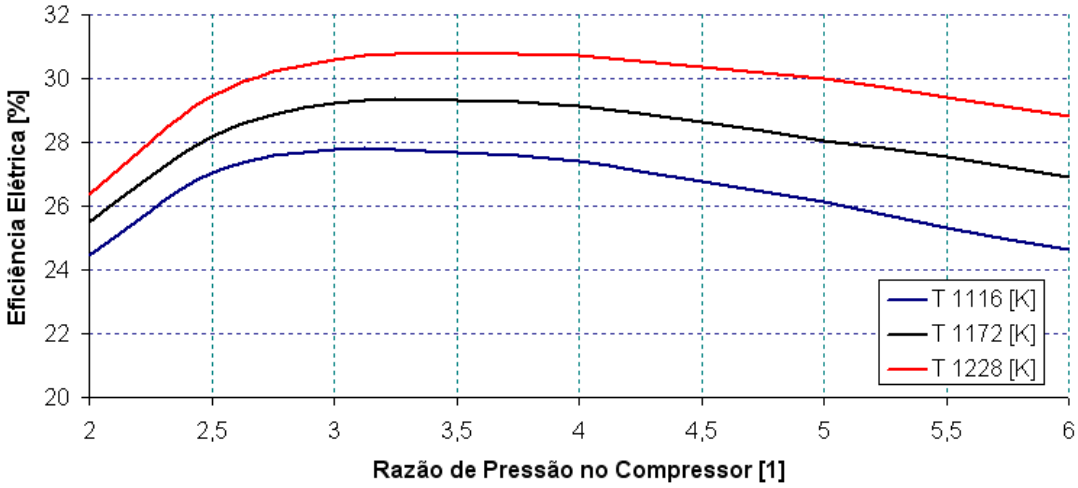


Figura 2. 4 Eficiência da micro turbina a gás em função da razão de pressão do compressor e da temperatura do gás na entrada da turbina, EPA (2002)

Nota-se da Figura 2.4 que a eficiência elétrica máxima compreende os valores 27,9 [%], 29,5 [%] e 30,8 [%], respectivamente para as temperaturas de 1116 [K], 1172 [K] e 1228 [K], entre as razões de pressão do compressor de 3 a 4.

Desta forma, muitos fabricantes buscam desenvolver micro turbinas dotadas de compressores que garantam razões de pressão entre 3 e 4, a fim de garantir as maiores eficiências elétricas. O compressor que atende este requisito normalmente é uma turbo máquina radial com um único estágio, Lefebvre (1983).

A Figura 2.5 apresenta o custo unitário típico para micro turbinas a gás em função da potência instalada, segundo EPA (2002). Este custo comporta-se como uma função inversa da potência instalada.

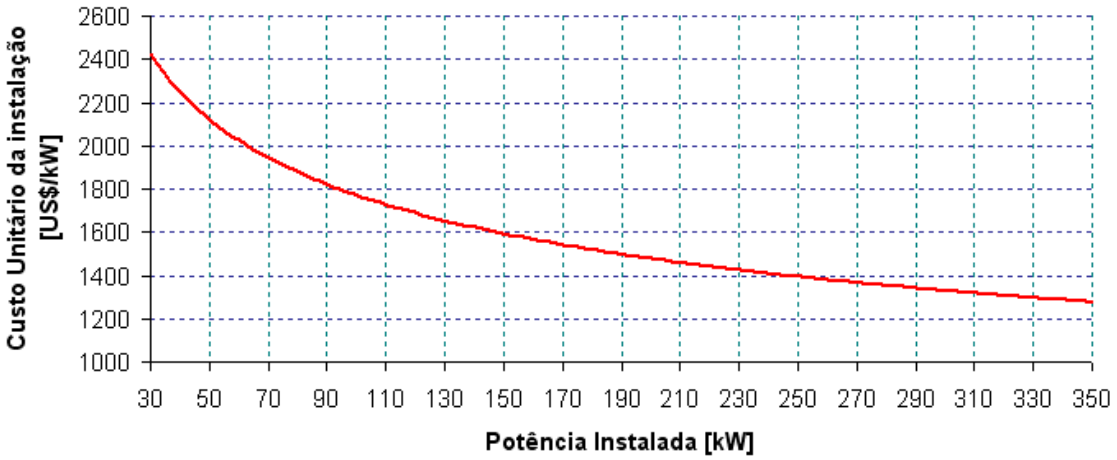


Figura 2. 5 Custo unitário da instalação das micro turbinas a gás em função da potência instalada, EPA (2002)

2.2.1 Principais Fabricantes

No mercado internacional, os principais fabricantes de micro turbinas a gás são: Allison Engine, Capstone Turbine, Bowman Power, Turbec, Honeywell (antiga AlliedSignal), Elliott Energy Systems, Solar Turbines, General Electric, Turbomeca, Turbo-Genset, Asea Brown Boveri e Ingersoll-Rand.

Na Tabela 2.1, apresentam-se algumas micro turbinas a gás fabricadas em função do fabricante, da potência útil nominal e da eficiência total.

Tabela 2. 1 - Micro turbinas instaladas no mundo, Antonio et. al. (2003)

Fabricante	Modelo	Potência Nominal [1] (Kw)	Rendimento Total (%)
Bowman Power (Inglaterra)	Turbogen TG35	35 – 45	21,0 – 12,5
	Turbogen TG50	50 – 60	24,0 – 13,5
	Turbogen TG80	80 -- 95	26,0 – 14,0
Capstone (USA)	Model 30	30	27
	Model 60	60	28
	Model 200 [2]	200	33,5
Honeywell (USA)	Parallon 75	75	30
Turbec (Suécia)	T100 CHP System	100	30
Ingersoll-Rand (USA)	Model 70	70	29
	Model 120	120	30
	Model 250	250	30
Elliot Energy System (Canadá)	TA 45	45	30
	TA 80	80	30
	TA 200	200	30
Asea Brown Boveri	MT 100	100	30

[1] Condição temperatura ambiente de 15 [°C] ao nível do mar;
[2] Em fase de desenvolvimento pela University of Califórnia para acionamento de embarcações, http://www.energyvortex.com

As Figuras de 2.6 a 2.10 mostram alguns exemplos de micro turbinas atualmente em fabricação, detalhando a potência gerada, a eficiência global e a emissão média de NOx.

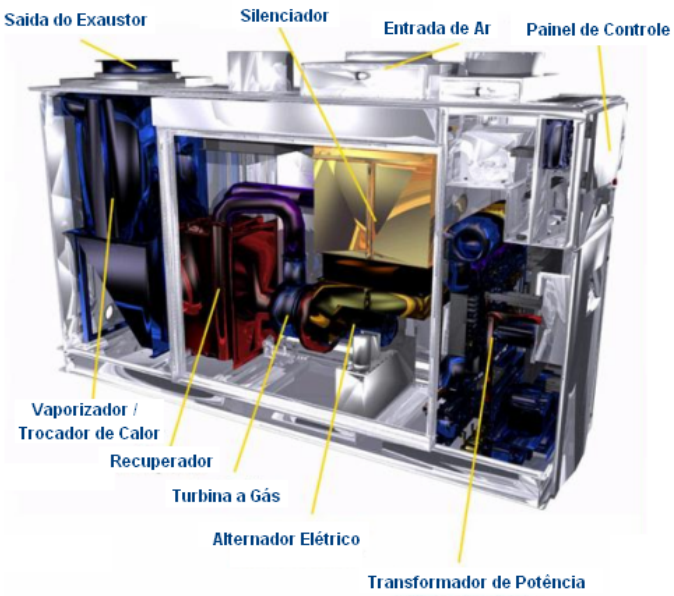


Figura 2. 6 Micro turbina de 80 [kW] com emissão de NOx de 25 [ppmv] à 15 [%[de O_2 e eficiência global de 80 [%] (com recuperador) da fabicante Bowman Power (2006)

Figura 2. 7 Micro turbina modelo C65 com potência de 65 [kW], eficiência global 82 [%] e emissão de NOx menor do que 5 [ppmv] à 15 [%[de O_2 para operar com gás natural da fabricante Capstone Micro Turbines (2006)

Figura 2. 8 Micro turbina modelo T100 CHP com potência de 100 [kW], eficiência global 77 [%] e emissão de NOx menor do que 15 [ppmv] à 15 [%[de O_2 para operar com gás natural da fabricante Turbec

Figura 2. 9 Micro turbina modelo CHP com potência de 100 [kW], eficiência global 75 [%] e emissão de NOx menor do que 24 [ppmv] à 15 [%[de O_2 para operar com gás natural da fabricante Elliot Micro Turbines (2006)

Figura 2. 10 Diferentes micro turbinas a gás, Solar Perkins Mars, Turbo-Genset e Harvester Company, respectivamente da esquerda para a direita

2.2.2 Aplicações

As principais aplicações das micro turbinas a gás são:

1 – Cogeração: o calor perdido pela micro turbina pode ser transferido via um trocador de calor para produzir vapor ou providenciar água quente para uma área local. A água quente pode ser usada em estufas no meio rural e sistemas de calefação de edifícios, em unidades de secagem ou torres de absorção;

2 – Geração distribuída de potência: a eletricidade é gerada localmente para manter a demanda em uma área local, por exemplo, o suprimento de eletricidade para uma pequena cidade, indústrias, shoppings, hospitais, hotéis, fabricas e colônias de férias, bem como, suprir as necessidades de comunidades localizadas em regiões isoladas desprovidas das grandes

redes de distribuição de energia elétrica e tubulações de gás natural para alimentar sistemas de aquisição de dados;

3 – Energização veicular: onde a micro turbina a gás pode ser conectada a um alternador de alta velocidade a fim de fornecer potência mecânica para o movimento do veiculo (carro, ônibus, caminhão e tanques de guerra) e energia elétrica a ser armazenada em baterias para atender demais componentes eletrônicos; e

4 – Ciclos híbridos Células a Combustível / micro turbinas a gás: aproveitamento eficiente da energia (eficiências da ordem de 60 [%]) com a vantagem de aumentar a eficiência da própria célula a combustível, porque a micro turbina pode aumentar a pressão operacional da mesma, bem como contribuir para a diminuição da emissão de poluentes (NOx, SOx e outros para patamares da ordem de 1 [ppm]) com aplicação em veículos e unidades de geração de eletricidade, como mostra a Fig. 2.11.

Segundo Antônio *et al* (2003), no Brasil a penetração da cogeração é ainda bastante reduzida e a micro - cogeração é praticamente inexistente. Isto ocorre em razão de fatores que vão desde o simples desconhecimento das tecnologias disponíveis, passando pela difícil competição com a eletricidade disponibilizada pela rede, de origem predominantemente hídrica, a variação do preço do gás natural, ausência de garantias para a venda do excedente de eletricidade, baixo percentual de utilização do calor gerado no equipamento de cogeração e, ainda, ausência de linhas de financiamento capazes de incentivar de forma efetiva e eficaz a difusão da tecnologia.

No caso da energização veicular, automóveis adaptados para operar com micro turbinas a gás começaram a ser fabricados pela General Motors em 1993, com destaque para o modelo EV-1, o qual se encontra na sua 2° geração. É capaz de atingir velocidade máxima de 295 (km/h) com autonomia de 8 horas. É um caso híbrido, porque utiliza uma combinação de célula a combustível e uma micro turbina a gás. Sua produção é limitada, porque a micro turbina a gás não tem o mesmo tempo de resposta que o motor de combustão interna, quando solicitada pelo condutor do veiculo durante acelerações.

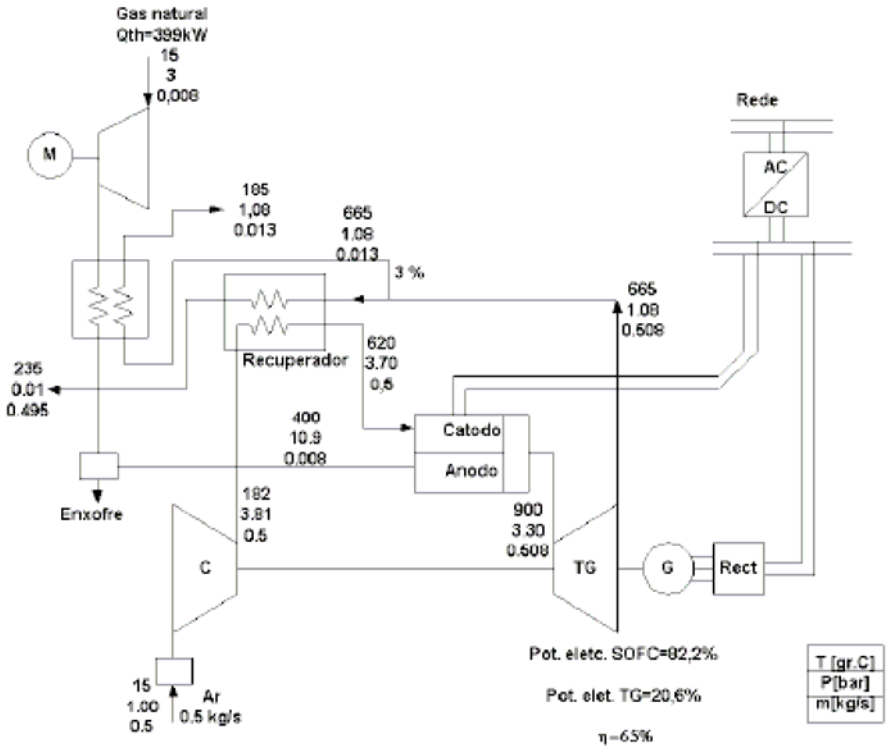


Figura 2. 11 Esquema de um ciclo híbrido de célula à combustível de óxido sólido com micro turbina a gás, com um recuperador de calor, um trocador de calor, duas unidades de compressão e um gerador elétrico, Camparani (2000)

A tecnologia das micro turbinas a gás remonta as APU ("Auxiliary Power Unit"), que consistem em pequenas turbinas a gás projetadas para suprir com potência auxiliar máquinas maiores comumente utilizadas em aeronaves, tais como nas sistemas de ventilação, potência elétrica e hidráulica para aviônicos, sistema guia de mísseis Oliver Hazard Perry, entre outros.

A Figura 2.12 apresenta uma APU típica.

Figura 2. 12 APU modelo APIC APS3200 para aviões Airbus fabricado pela Pratt Whitney (2006)

2.2.3 Características Construtivas Principais

O projeto das micro turbinas usualmente consiste de um compressor radial de simples estágio, uma câmara de combustão do tipo tubular ou anular, e um rotor de turbina radial de simples estágio.

A micro turbina a gás pode variar o arranjo de seus componentes de várias maneiras: adicionando compressores, turbinas, intercoolers entre os compressores, câmaras adicionais de combustão, trocadores de calor que podem ser usados no sistema de exaustão para aquecer o ar na entrada da câmara de combustão, utilizando um ou mais eixos. Estes arranjos podem ser utilizados para aumentar a potência útil e a eficiência térmica ao custo do aumento de sua complexidade geométrica e do processo de combustão envolvido, Lefebvre (1983).

A Figura 2.13 apresenta um arranjo típico de micro turbina, considerando o exemplo dado pala fabricante Casptone, dotado com um único eixo com pequena distância entre mancais.

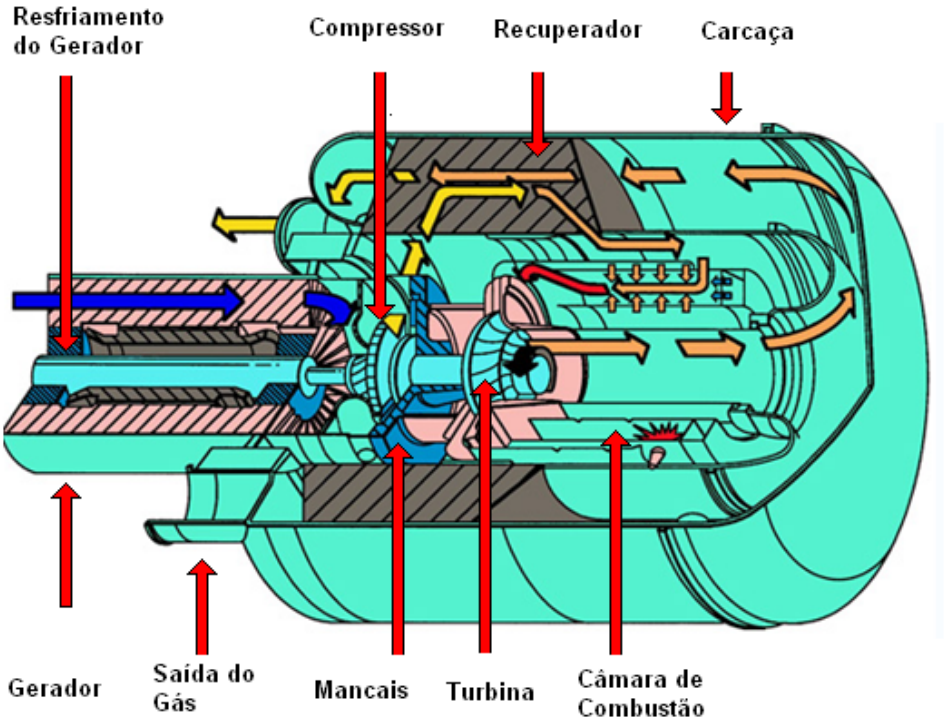


Figura 2. 13 Principais componentes de micro turbina a gás fabricada pela Capstone Turbines (2006)

No contexto mecânico, os mancais de rolamento e deslizamento representam os componentes críticos do projeto. Tradicionalmente, eles tem sido concebidos conforme conceito de mancais com lubrificação à óleo ou mancais de rolamentos de esferas com

resfriamento à óleo. Um novo tipo de mancal é o Mancal de Deslizamento (aerostático), os quais tem se tornado uma opção tecnicamente viável para micro turbinas a gás e APU, Capstone Micro turbines (2006).

O arranjo de turbinas a gás com dois eixos tem sido uma opção para movimentar uma série de compressores, tais como, em estações de bombeamento ou instalações de liquefação do gás natural na Islândia, por exemplo. Enquanto o primeiro eixo é comumente denominado de Gerador a Gás, consistindo em uma micro turbina a gás de alta velocidade, o segundo eixo é denominado de Turbina de Potência, consistindo em uma micro turbina a gás de baixa velocidade.

Este arranjo é normalmente usado para aumentar a velocidade e a potência da saída necessários para acionar um alternador. Segundo Rodgers *et al*l (2001), as micro turbinas trabalham com rotações 20 a 50 vezes maiores do que as turbinas de maior porte.

Entretanto, apesar da alta velocidade das micro turbinas, a velocidade periférica das palhetas das micro turbinas e das turbinas de maior porte é semelhante, devido à diferença na escala entre os rotores das turbinas, segundo Willis & Scott (2000).

Do ponto de vista mecânico, os compressores e turbinas utilizados em micro turbinas a gás são turbomáquinas radiais de siimples estágio.

Com o compressor radial é possível atingir-se razões de pressão entre 3:1 e 4:1 em um único estágio, enquanto que num compressor axial é necessário cerca de quatro estágios. Para razões de pressão mais altas do que 4:1, deve-se usar mais de um estágio, o que aumenta a complexidade do projeto.

É fato que a maioria das micro turbinas a gás com potência abaixo de 100 [kW] usam turbinas radiais junto com compressores radiais em um eixo, o que permite diminuir a distância entre mancais e caracterizar o pequeno espaço ocupado pela micro turbina a gás, Rodgers *et al*l (2001).

Considerando o estágio tecnológico atual, as micro turbinas a gás apresentam as seguintes características construtivas positivas em relação as turbinas a gás::

a) Pequeno número de partes em movimento;

b) Tamanho compacto;

c) Leve (baixa relação peso/potência);

d) Elevada eficiência em sistemas de co-geração;

e) Baixo nível de emissões;

f) Pode operar com combustíveis de baixo poder calorífico; e

g) Longo tempo de intervalo entre manunteções.

Contudo, as micro turbinas a gás também possuem limitações, tais como, Poullikkas (2006):

a) Tempo de resposta em veículos;

b) Consumo de combustível durante a ignição inicial;

c) Carga térmica; e

d) Uso restrito do compressor radial.

Com relação à primeira limitação, as micro turbinas a gás podem gastar um tempo maior do que os motores de combustão interna com relação às mudanças de potência requerida, seja no acionamento veicular, seja pelo aumento da demanda pela rede elétrica, caso conectados. Existem pesquisas sendo realizadas nos EUA e Europa utilizando dispositivos elétricos, denominados Reguladores de Carga, que começam a corrigir esta limitação, Pavlas *et al* (2005).

A segunda limitação está relacionado também a necessidade de regulagem da carga requerida no início da ignição, após um período em que a unidade permaneceu parada. Sem uma regulagem adequada, é necessário um consumo adicional de combustível para vencer o atrito interno nos eixos de giração do grupo turbina / compressor. Por razões econômicas, já é prática comum manter as micro turbinas a gás operando continuamente, uma vez ligadas.

No entanto, esta limitação também está sendo pesquisada e não deverá significar um obstáculo técnico maior para um futuro próximo, Pavlas *et al* (2005).

A terceira limitação está relacionada à carga térmica máxima que as pás do rotor da turbina são capazes de suportar. Como a eficiência global depende da eficiência do compressor, da câmara de combustão e da eficiência da turbina, está última função da temperatura da exaustão da câmara de combustão, é prática desenvolver projetos onde esta temperatura dos gases na entrada da turbina seja a maior possível. Novos materiais do tipo cerâmico têm sido testados para a construção das pás do rotor da turbina. Os mesmos são capazes de suportar temperaturas mais altas (da ordem de 1500 [K]), todavia, contribuem para aumentar o seu custo operacional, Poullikkas (2006).

A última limitação relacionando o uso dos compressores radiais para micro turbinas a gás ao invés dos compressores axiais, que possuem maior eficiência, representa um obstáculo ainda não solucionado. Os compressores axiais devem sua alta eficiência em relação aos compressores radiais devido à folga existente entre o estator e o rotor.

No entanto, os compressores radiais, que são mais baratos do que os axiais, apresentam eficiência que não é afetada por este tipo de folga, podendo ser reduzidos em

escala com o diâmetro médio do seu rotor para adaptar-se as necessidades das micro turbinas a gás. Por outro lado, a folga existente entre estator e rotor no compressor axial não pode ser diminuída na mesma proporção escalar em relação ao diâmetro do seu rotor, vindo a comprometer não somente a sua eficiência, como também suas pás assumiriam dimensões de difícil fabricação, EPA (2002).

Além disso, devido às suas características construtivas, a pressão fornecida pelos compressores radiais é sensivelmente afetada pela rotação. Por menor que seja a variação na rotação do mesmo em relação à rotação nominal, pode acarretar uma flutuação de pressão do ar usado na câmara de combustão suficiente para influenciar na instabilidade da chama. Nos compressores axiais, a folga existente entre o estator e o rotor consegue compensar esta flutuação da pressão.

2.2.4 Comparação com Outras Tecnologias de Geração Elétrica

Das cinco fontes de geração elétrica disponíbilizadas no Brasil (micro turbinas a gás, células a combustível, baterias químicas, motores de combustão interna e células solares), as micro turbinas a gás e as células a combustível são as que menos agridem o meio ambiente, pelas seguintes razões: primeiro, o gás natural usado nas micro turbinas apresenta baixíssimas emissões de poluentes; e segundo, o hidrogênio utilizado pelas células a combustível combina com o oxigênio e forma água.

De acordo com Appleby (1995), as baterias químicas, concebidas em semelhança a Pilha de Alessandro Volta (1745-1827), funcionam com base na reação química entre placas de chumbo e uma solução eletrolítica de ácido sulfúrico dissolvido em água destilada na proporção de 70% de água e 30 % de acido. São capazes de gerar eletricidade com voltagem de 6 ou 12 (volts). As mesmas são aplicadas em todos os meios de transporte e nas unidades de células solares, para armazenamento da energia solar para ser usada durante o período noturno.

Apesar de facilidade de transporte e instalação, apresenta um forte inconveniente: depois de usada, a bateria representa um agente perigoso para o meio ambiente, pois se for armazenada em local e em condições impróprias, a mesma pode vazar ácido contaminando aterros sanitários e o lençol freático.

De acordo com Ugursal (2006) e Bove e Lunghi (2006), as células a combustível funcionam com base em duas reações químicas: primeiro, ocorre a liberação de elétrons do gás hidrogênio pressurizado sobre uma placa negativa (anodo) ao reagir com um catalisador;

segundo, após percorrer um circuito fechado até um motor elétrico, por exemplo, os elétrons do hidrogênio reagem com o gás oxigênio do ar bombeado sobre uma placa positiva (catodo) ao reagir com outro catalisador, contribuindo para a formação de água, uma vez que átomos de hidrogênio são transportados até o catodo através de uma membrana eletrolítica. Na segunda reação, também é liberado calor suficiente para vaporizar a água.

As células a combustível têm o potencial de poderem ser utilizadas numa grande variedade de aplicações, desde automóveis e equipamentos portáteis como os telefones celulares, até os setores militares, naval, espacial e aéreo, incluindo a geração de energia estacionária e portátil. Atualmente, é possível aliar a tecnologia das células a combustível com as micro turbinas a gás com a utilização de uma fonte comum de hidrogênio, que pode ser: gás natural, gás de biomassa, etanol, metanol e diesel, Bove e Lunghi (2006).

De acordo com Ghoneim (2006), as células solares consistem em placas fotovoltaicas, feitas em lâminas de silício sobrepostas, capazes de transformar luz em eletricidade, mesmo em dias nublados.

A utilização das células fotovoltaicas no mundo tem crescido em grande escala. Seu custo, conseqüentemente, tem diminuído ao ponto que diversos países podem desfrutar esta tecnologia. Em Israel, por exemplo, 70% das casas têm coletores solares. Na Indonésia, existem milhares de casas iluminadas por este meio, além de alguns protótipos de carro movidos a luz solar já rodarem no Japão, Alemanha e EUA. No Brasil, as mesmas têm sido usadas para os mais diversos fins, tais como: fonte auxiliar para a iluminação pública em postes; iluminação de casas; instalações de bombeamento, entre outros.

Por outro lado, as células solares possuem o inconveniente de utilizar baterias químicas para armazenar temporariamente sua energia. Estas, por sua vez, tem os mesmos problemas com relação ao impacto ambiental citados anteriormente.

Em relação aos motores de combustão interna, as micro turbinas oferecem vantagens substanciais, quando considerada a mesma faixa de capacidades, sendo que entre estas vantagens se destacam os menores índices de emissão, a manutenção reduzida, a maior confiabilidade e a menor necessidade de equipamentos auxiliares.

Segundo Pavlas *et al* (2005) e Poullikkas (2006), tomando-se como base a relação custo / beneficio, os custos das micro turbinas a gás ainda são relativamente maiores do que os custos com motores de combustão interna à pistão. Todavia, seu custo é competitivo se comparado às unidades movidas com células à combustível.

Tomando-se os motores a diesel, cuja combustão se inicia a partir de uma auto ignição do diesel quando submetido à alta pressão junto com ar, o que confere a este tipo de

equipamento maior potência produzida se comparado aos outros motores de combustão interna, mantido o mesmo consumo específico de combustível, apresenta enxofre em sua composição química, que podem formar ácidos em contato com água.

Desta forma, este equipamento pode ter maior emissão de agentes poluentes do que as micro turbinas a gás. Contudo, com as pesquisas em desenvolvimento sobre biodiesel, a emissão deste tipo de motor pode diminuir para patamares até 90 [%] menores do que o atual, que se encontra entre 150 a 250 [ppmv] ou 15,4 [g / kW.h] para o NOx, conforme NBR 14489.

Maiores detalhes sobre estas tecnologias são encontrados em Appleby (1995), Ugursal (2006) e Ghoneim (2006).

2.3 Câmaras de Combustão

Dentre os componentes da micro turbina a gás, pode-se destacar as câmaras de combustão, devido à sua importância no processo de transformação da energia interna a fim de produzir potência na turbina.

O projeto de câmaras de combustão de micro turbinas não é uma aplicação direta em escala da tecnologia das câmaras maiores, uma vez que nas micro turbinas há alguns efeitos que devem ser considerados, tais como: o efeito crescente de resfriamento da parede da câmara e o baixo fluxo de combustível, que implica em um número menor de injetores.

O material que tem sido usado nas câmaras de combustão é aço-liga rico em níquel e material cerâmico na exaustão, constituído por Si_3N_4, que melhora a resistência térmica e mecânica em relação às temperaturas da ordem de 1500 [°C].

De todo o ar fornecido pelo compressor, cerca de 25 [%] em volume é aproveitado nos injetores para reagir com o combustível no interior da câmara de combustão e 75 [%] é usado na estabilização da chama, diluição e resfriamento dos gases quentes nos produtos da combustão para minimizar o efeito da fluência e não comprometer a resistência mecânica das pás do rotor da turbina.

O ar do injetor usado na combustão também é denominado Ar Primário, enquanto o ar usado na diluição e resfriamento dos gases quentes também é denominado Ar Secundário.

De modo geral, Lefebvre (1983) mostra que as câmaras de combustão possuem alguns valores típicos, tais como: velocidade do escoamento do ar na saída do compressor pode estar entre 120 a 150 [m/s]; velocidade do ar no injetor pode estar entre 25 a 30 [m/s]; a razão ar / combustível típica entre 4 a 8 partes de ar para cada 1 parte em peso de combustível; a

temperatura da combustão entre 1800 a 2100 [°C]; a temperatura dos gases quentes na exaustão entre 760 e 850 [°C].

De qualquer forma, uma vez iniciada a combustão por um sistema de ignição, a mesma deve ser contínua e auto-suficiente.

Segundo Lefebvre (1983), todas as câmaras de combustão contêm os mesmos elementos básicos, tais como: uma carcaça ou concha externa, também conhecida como câmara de resfriamento; um tubo de chama com paredes dotadas de orifícios laterais; injetores de combustível e sistema de ignição.

Na Tabela 2.2, mostram-se algumas diferenças básicas entre típicos arranjos de câmaras:

Tabela 2. 2 Diferenças básicas entre câmaras de combustão, Lefebvre (1983

Tipo	Aspectos positivos	Aspectos Negativos
Tubular ou Cilíndrica	1. Mecanicamente robusta; 2. As características dos escoamentos de ar e do combustível são facilmente combinadas; 3. A bancada de teste necessita somente de uma fração da vazão em massa total de ar.	1. Volumosa e pesada; 2. Alta perda de pressão; 3. Necessita de interconectores entre tubos de chama para equilíbrio de pressão; 4. Problemas no acendimento das chamas.
Tubo-anular	1. Mecanicamente robusta; 2. Padrão do escoamento de ar permite facilidade de combinar com combustível; 3. A bancada de teste necessita somente de uma fração da vazão em massa total de ar; 4. Baixa perda de pressão; 5. Menor e mais leve do que a câmara tubular.	1. Menos compacta do que a anular; 2. Necessita de interconectores entre tubos de chama para equilíbrio de pressão; 3. Problemas no acendimento das chamas.
Anular	1. Comprimento e peso mínimo; 2. Área frontal da turbina a gás mínima. 3. Mínima perda de pressão; 4. Fácil acendimento da chama.	1. Problema sério no tamanho da saída do tubo de chama; 2. Sistema de ignição é relativamente grande em proporção a volume da câmara; 3. Dificuldade de combinar o padrão do escoamento de ar com o de combustível; 4. Dificuldade de manter estável o perfil transversal de temperatura na saída.

Da Tabela 2.2, entre os aspectos negativos para as câmaras anulares, pode-se destacar ainda o resfriamento da parede do tubo de chama, em vista da sua área superficial ser relativamente grande em relação ao seu volume e a dificuldade para equilibrar a pressão do ar advindo dos orifícios laterais do tubo de chama, as quais também afetam estabilidade da chama e a diluição dos gases na exaustão, Lefebvre (1983).

A câmara de combustão anular ainda tem o menor fator de perda de pressão, o que pode conflitar com o fato de que uma alta perda de pressão é necessária para uma boa mistura ignitável.

Uma forma de avaliar a perda de pressão em câmaras de combustão é através da equação sugerida por Lefebvre (1983) para a perda de pressão dinâmica total ao longo do tubo de chama ΔP:

$$\frac{\Delta P}{P_3} = \psi * \frac{R}{2} * \left(\frac{\dot{m}_3 * T_3^{0,5}}{A_{ref} * P_3} \right)^2 \qquad (2.1)$$

Onde o lado esquerdo da equação se refere a perda de pressão total relativa à pressão dinâmica $\mathbf{P_3}$ na entrada de ar na maior seção transversal do tubo de chama e varia de 4 a 8%, não incluindo a perda por calor, principal perda do processo de combustão; $\boldsymbol{\psi}$ representa o fator de perda de pressão, que denota a resistência do escoamento introduzido dentro da corrente de ar entre a saída do compressor e a entrada da turbina, equivalente à soma da perda de carga no difusor e no tubo de chama,; **R** é o raio de referência correspondente a parte externa do tubo de chama; $\mathbf{m_3}$ é a vazão mássica de ar que passa pela maior seção transversal do tubo de chama; $\mathbf{T_3}$ é a temperatura do ar que passa pela maior seção transversal do tubo de chama; $\mathbf{A_{ref}}$ é a área transversal de referência na câmara anular.

A perda de pressão dinâmica total $\mathbf{\Delta P / P_3}$ normalmente está entre 1 (%) e 3 (%), segundo EPA (2002).

Efetuando-se uma análise das perdas, utilizando a equação 2.1, verifica-se que a câmara de combustão anular tem a vantagem de ter a menor perda de pressão, quando comparada com câmaras tubulares e tubo-anulares. Embora a perda da pressão total seja a mesma encontrada em câmaras tubulares, o termo relativo a velocidade, $\dot{m}_3 * T_3^{0,5} \Big/ A_{ref} * P_3$, é maior para a câmara anular, implicando num baixo valor de $\mathbf{A_{ref}}$, incorrendo uma menor câmara de combustão para uma dada carga aerodinâmica, Lefebvre (1983)..

Desta forma, verifica-se que entre os diferentes tipos de câmaras de combustão, a câmara anular tem sido adotada na maioria dos projetos de micro turbinas a gás em face de sua reduzida área transversal de referência e seu aspecto construtivo favorecer o seu encurtamento e dobramento, os quais contribuem na diminuição do volume da micro turbina, facilitando sua instalação em qualquer lugar.

Para o presente trabalho, a câmara de combustão adotada é do tipo Anular, porque existe uma micro turbina a gás da fabricante Solar Turbines instrumentada para realização de testes experimentais no Laboratório de Sistemas Térmicos no NEST – UNIFEI.

2.3.1 Combustíveis para Micro Turbinas a Gás

As micro turbinas a gás podem operar com diferentes combustíveis líquidos ou gasosos, sendo os combustíveis comumente utilizados: diesel, querosene e o gás natural.

Atualmente, existem pesquisas em andamento buscando avaliar a aplicação de combustíveis alternativos, visando contribuir para a redução do nível de emissões de poluentes, podendo ser destacados: gás da gaseificação da biomassa, biogás e biodiesel.

Para o presente trabalho, utiliza-se o gás natural como combustível de referência para acionar uma câmara de combustão de uma micro turbina a gás da Solar Turbines, a qual foi projetada para opera com disel e/ou querosene.

O gás natural é um combustível fóssil acumulado durante milhões de anos junto ao petróleo no seu estado natural. Sua massa específica média é de 0,796 [kg/m^3] na condição ISO (temperatura 15 [°C] e pressão 1 [atm]) e é constituído em percentual de volume por: 75 [%] a 97 [%] de metano; 1 [%] a 16 [%] de nitrogênio; 1 [%] de dióxido de carbono; e 2 [%] a 20 [%] de outros hidrocarbonetos, com Poder Calorífico variando de 32 a 48 [MJ/N.m^3], segundo Bolz e Tuve (1970).

Como características positivas podem ser citadas, Handbook of Chemistry and Physics (2005): a) Baixo impacto ambiental, pois sua combustão produz baixíssimas concentrações de CO_2 (responsável pelo efeito estufa), NOx (co-responsável pela chuva ácida e pela poluição química) e nenhuma emissão de óxidos de enxofre; b) Facilidade de transporte e manuseio; c) Apresenta alta eficiência de queima; d) Rápida dispersão no ar em caso de vazamentos, devido ao baixo peso molecular do seu principal componente, o metano; e) A temperatura máxima da chama à pressão constante e igual a 1 (atm) em condição não adiabática é de, aproximadamente, 2148 [°C].

Como características negativas podem ser citadas: é uma fonte não renovável, portanto finita, de origem fóssil; e Apresenta risco de asfixia, incêndio e explosão, apesar dos inúmeros mecanismos de controle.

2.3.2 Funcionamento de Câmara de Combustão Testada

A câmara de combustão do tipo anular adotada utiliza como combustíveis o querosene e/ou diesel e encontra-se montada em uma micro turbina a gás, modelo T-62T–32 fabricada pela SOLAR Turbines potência máxima de 50 [kW]. Mais detalhes desta micro turbina são apresentados no capítulo 4.

É constituída por 24 orifícios laterais no tubo de chama, 6 injetores de combustível dispostos de um ângulo de 60° de um em relação ao outro, em referência ao eixo principal. Existem 86 orifícios localizados numa posição externa radial em relação eixo principal e 46 orifícios dispostos em uma posição interna radial em relação ao eixo principal, ambos no entorno dos injetores de combustível.

Os injetores são do tipo Venturi, onde existe um pequeno estrangulamento na seção de escoamento do ar, imediatamente na saída do injetor de combustível. Devido a este estrangulamento, gera-se uma zona de baixa pressão que favorece o arrasto do combustível pelo ar, sendo ambos injetados juntos na zona de combustão da câmara.

Nestas condições, pode ocorrer uma pequena pré-mistura do combustível com o ar antes da zona de combustão. Todavia, isto não significa que a chama será sempre do tipo Pré-misturada (ou seja, o combustível e seu oxidante se misturam antes da zona de combustão), mesmo porque depende das propriedades físicas do combustível, principalmente de sua massa específica e de sua viscosidade, bem como da razão ar / combustível.

Outro fator igualmente importante é a temperatura da mistura ar e combustível que pode afetar os limites de flamabilidade do combustível, ou seja, dependendo do peso específico do combustível, da razão ar/ combustível e da presença de centelha, o combustível pode ou não manter sua combustão continuada A Figura 2.14 apresenta as curvas de flamabilidade e auto-ignição de alguns combustíveis, em função da temperatura da mistura e de sua densidade relativa.

De fato a densidade relativa influi na possibilidade de auto-ignição e nos limites de flamabilidade. Nos trabalhos de Tomczak *et al*. (2002), Ilbas *et al* (2006), e Cozzi e Coghe (2006), por exemplo, onde se estuda o efeito da adição gradual de hidrogênio sobre o processo de combustão do gás natural não pré-misturado, tendo o hidrogênio densidade relativa menor do que o gás natural, observa-se que nas misturas ar-hidrogênio-metano ocorre um aumento na velocidade da chama, causando um aumento no intervalo entre os limites de flamabilidade. Além disso, a chama tende a ter maior estabilidade e maior probabilidade de auto-ignição.

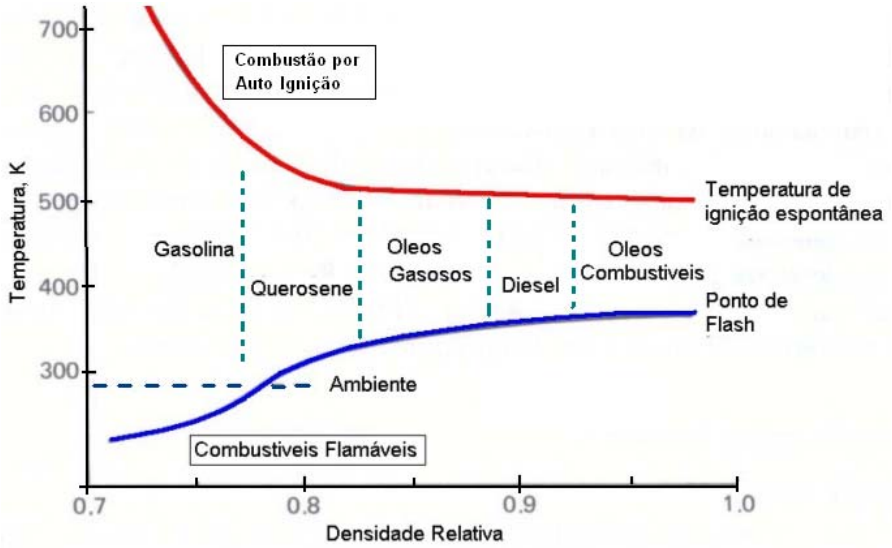


Figura 2. 14 Característica de auto ignição de alguns combustíveis, Lefebvre (1983)

Da Figura 2.14, verifica-se ainda que para temperaturas pouco acima da temperatura ambiente, os combustíveis são normalmente flamáveis e não existe a auto ignição, pois quando é retirado o agente que provoca a centelha, a chama se apaga. A temperatura a partir do qual os combustíveis são flamáveis define o Ponto de "Flash".

Desta forma, nota-se que somente a partir de 500 [K], o diesel possui auto-ignição. Por outro lado, o querosene necessita atingir temperaturas da ordem de 600 [K] para ter esta mesma característica, devido à sua menor densidade relativa.

Os limites da flamabilidade são investigados por Ciccarelli *et al*. (2006) em chamas produzidas pela combustão de uma mistura hidrogênio e amônia no ar, verificando que a flamabilidade é função da temperatura inicial das misturas. Se a mesma é mantida elevada e constante, a flamabilidade pode ser modificada em função da densidade da mistura, conforme havia sido assinalado por Lefebvre (1983).

Em se tratando da utilização do gás natural na câmara de combustão adotada por este trabalho, o comportamento da chama pode ser afetado, quanto à distribuição de pressão, temperatura e emissões, e diferenciar-se da chama produzida pela combustão dos combustíveis especificados pela Solar Turbines, ou sejam, o diesel e/ou querosene. Este comportamento diferenciado depende das propriedades físicas dos combustíveis analisados.

No caso de combustíveis gasosos, por exemplo, a viscosidade aumenta com a temperatura, incorrendo no aumento da força de arrasto do ar em relação ao combustível, maior será a velocidade do escoamento da mistura ignitável em relação à velocidade da chama, implicando em uma maior penetrabilidade do combustível na zona de combustão. Este comportamento assemalha-se às chamas do tipo difusiva ou não pré-misturadda, que podem

ter taxas de reação maiores do que a taxa de mistura entre combustível e ar, segundo Louis *et al*. (2001).

Por outro lado, na câmara de combustão testada neste trabalho, existe um fator adicional: os injetores estão inclinados em relação ao eixo longitudinal principal da câmara, induzindo a formação de um escoamento secundário rotativo, que induz um maior tempo de residência para a chama. A geometria da câmara também afeta a natureza da chama, Peters (2000).

Desta forma, é recomendável a realização de testes a fim de verificar o tipo de chama, que pode ser produzida, dependendo da funcionalidade e do tipo de combustível utilizado pela câmara de combustão.

Outro aspecto igualmente importante a considerar no comportamento deste tipo de câmara de combustão é a influência dos 24 orifícios laterais do tubo de chama.

O ar da câmara de resfriamento ou pré-câmara é deslocado por estes orifícios para a região interna da câmara de combustão numa posição, onde a geometria pode favorecer o aparecimento de duas importantes recirculações: a primeira, na direção oposta ao jato da mistura ar e combustível, afeta diretamente o posicionamento da chama, sendo responsável pela sua ancoragem e estabilidade; e a segunda recirculação, no mesmo sentido do fluxo dos gases quentes em direção à exaustão, afeta a diluição destes gases e a distribuição da temperatura e das emissões na exaustão.

Sob o aspecto da transferência de calor, as câmaras de combustão possuem condução, convecção e radiação.

No estudo de escoamentos em camras de combustão, é usual considerar apenas a radiação e a convecção. O percentual de participação destas formas de transferência de calor é de difícil determinação, em face da quantidade de variavveis envolvidas no fenômeno da combustão. Segundo Lefebvre (1983), pode ser considerado como regra geral que no caso da combustão completa, a mesma pode ser isenta de elementos particulados (fuligem), que possuem a característica de afetar a radiação no meio escoante, mediante a absorção da mesma, o que contribui para manter a temperatura mais elevada no meio. Nestas condições, a radiação pode ocupar entre 70 [%] a 80 [%] do processo de transferência de calor, restando de 20 [%] a 30 [%] para a convecção.

Contudo, nos processo de combustão isentos de fuligem, a quantificação se altera e a participação da radiação pode ser reduzida para a ordem de 40 [%] a 50 [%], sendo de 50 [%] a 60 [%] devido à convecção. No item 2.5, apresenta-se o equacionamento básico do processo de trasferência de calor em câmaras de combustão.

Todavia, o resfriamento das paredes laterais se realiza através da transferência de calor por convecção com a admissão de ar pelos orifícios laterais do tubo de chama.

Nessa condição, deve-se levar em conta a partir dos estudos de Williams (1985) e Vandebroek *et al* (2003) um outro importante fenômeno físico, que pode ser considerado no estudo da combustão, é o Efeito Convectivo, o qual é decorrente da variação da massa especifica com a temperatura. Devido a este fenômeno, ocorre não somente transporte de energia na forma de calor, mas também o transporte de massa, ocasionando em câmaras dispostas na posição horizontal: a) Pertubação da simetria da combustão; e b) Deformação da chama a partir da saída do injetor.

Sob o aspecto das emissões, de modo geral, conforme apresenta Williams (1985), sobre o estudo das emissões, a maioria dos combustíveis produzem em suas emissões: Monóxido de Carbono (CO), Monóxido de Nitrogênio (NOx), Óxidos de enxofre (SOx), alguns elementos particulados ricos em carbono e parte dos hidrocarbonetos que não reagiram completamente com o oxidante. Maiores detalhes sobre os mecanismos de formação do NOx são apresentados no item 2.6.

2.4 Caracterização da Combustão

A combustão é um fenômeno complexo, porque depende de muitas variáveis físicas, agregando conceitos da Mecânica de Fluídos, Termodinâmica e Química, tendo ampla aplicação nas indústrias de produção de energia, propulsão de jatos e foguetes, sistemas de prevenção contra incêndios, controle de poluentes e processamento de materiais.

No caso particular das câmaras de combustão, as mesmas podem apresentar problemas quanto ao escoamento da mistura ignitável e ao processo de combustão, que merecem uma análise mais apurada, tanto no aspecto aerodinâmico, quanto no termodinâmico, em virtude do grande número de variáveis envolvidas.

Em primeiro lugar, o processo de combustão pode ser dividido em quatro fases básicas, conforme Williams (1985) e Xinming (2001):

a) Ignição;

b) Propagação;

c) Extinção; e

d) Diluição.

A ignição é realizada a partir da centelha produzida pela passagem de corrente elétrica por um pequeno terminal elétrico colocado no interior da câmara de combustão.

Uma vez gerado este arco voltáico, as moléculas do combustível e do oxidante nesta região recebem energia suficiente para desencadear a reação de combustão, que se propaga como uma reação em cadeia para formar a chama, William (1985). Se a temperatura da mistura ignitável for suficiente alta, conforme Fig. 2.14, a combustão será contínua, mesmo após a retirada do agente que provocou a centelha, Levy e Lian (2006).

Nesta condição, a chama pode propagar-se até uma certa distância a partir do sistema de injeção, onde a concentração de ar e de combustível já não é suficiente para manter a reação, constituindo na interface de extinção da chama. A partir desta interface, somente os gases quentes produtos da combustão existem, formando a quarta fase da combustão, denominada diluição, que é caracterizada pela admissão de ar através dos orifícios laterais no turbo de chama, os quais geralmente ficam localizados nas proximidades da exaustão.

Entre as muitas variáveis envolvidas no processo de combustão, sob o aspecto físico-químico, podem ser destacadas, Williams (1985):

a) densidades relativas do combustível e do ar;

b) viscosidade do ar e do combustível;

c) volatilidade do combustível (vaporizar-se à temperatura ambiente);

d) flamabilidade do combustível (sofre reação química em função da temperatura);

e) estado físico do combustível (sólido, líquido e gasoso);

f) taxa de reação química (função da temperatura inicial da mistura e da concentração da mistura);

g) natureza da reação (estequiométrica ou não estequiométrica);

h) calor de reação (energia para quebrar as ligações químicas das substâncias);

i) direção do movimento das moléculas de ar e combustível na mistura;

j) número de elétrons existentes na camada de energia mais externa nas moléculas que podem ser compartilhados;

l) energia de ativação;

m) tempo de residência da reação;

n) freqüência das colisões; e

o) distância intermolecular.

Em particular, o tempo de residência dos produtos na reação de combustão pode afetar a eficiência da combustão na medida que o aumento do tempo de residência favorece a realização de combustão completa e a menores emissões de poluentes, Shibahara e Katsuki (2006), Cozzi e Coghe (2006) e Williams (1985).

Este tempo de residência pode ser alcançado com a modificação aerodinâmica do injetor a fim de introduzir perda de carga e/ou correntes de recirculação pontuais, como se constata nos trabalhos de Lefebvre (1983).

Desta forma, considerando o aspecto termo-aerodinâmico, segundo Chigier e Berr (1983) e Lefebvre (1983), existem variáveis adicionais, destacando-se:

a) Velocidade de propagação da chama;

b) Pressão e velocidade dos escoamentos do combustível e do ar no injetor;

c) Da turbulência no escoamento;

d) Concentração do ar e do combustível (razão ar / combustível);

e) Variação da densidade do ar e do combustível segundo a variação da temperatura (Efeito convectivo);

f) Perdas de carga distribuídas no interior da câmara;

g) Recirculação devido aos orifícios laterais do tubo de chama; e

h) Temperatura inicial da mistura.

Em particular, o principal efeito da turbulência na combustão é aumentar a taxa de reação ou, em outras palavras, diminuir o tempo químico da reação.

A Figura 2.15.apresenta as curvas características do tempo de combustão do gás metano, em função da razão de equivalência Φ, ou seja, a relação entre a razão ar / combustível da mistura pela razão ar / combustível estequiométrico da mistura.

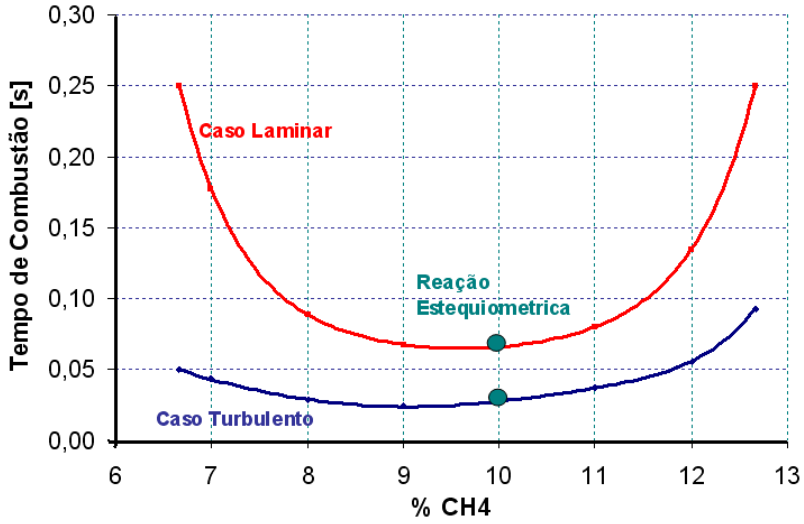


Figura 2. 15 Curvas características referentes ao tempo de combustão necessário para atingir a pressão máxima da combustão completa para a combustão do metano com ou sem turbulência, em função da razão de equivalência (a proporção estequiométrica corresponde à razão de equivalência 10 [%] para o metano), Poinsot e Veynante (2005)

O efeito da turbulência observado na Figura 2.15 sobre a chama é um fator crucial que justifica a pesquisa de câmaras de combustão dotadas de injetores que fornecem o aparecimento do escoamentos turbulentos, a fim de obter maior eficiência da combustão. Este é o caso do injetor existente na câmara de combustão do tipo anular testada por este trabalho.

Da Figura 2.15, nota-se ainda que o tempo de combustão (reação) para o gás metano em um escoamento turbulento em condições estequiométricas é de aproximdamente 0,030 (s), aumentando para condições não estequiométricas. Para escoamento laminar, este tempo aumenta para, aproximadamente, 0,070 (s).

Matematicamente, ambas as curvas apresentadas pela Fig. 2.15 podem ser dadas pelas seguintes equações:

$$t_{laminar} = 115.78 - 71.055.\Phi + 18.244.\Phi^2 - 2.5042.\Phi^3 + \\ + 0.1937.\Phi^4 - 0.008.\Phi^5 + 0.0001.\Phi^6 \qquad [\text{segundos}] \qquad (2.2)$$

$$t_{turbulento} = 15.525 - 10.547.\Phi + 2.9991.\Phi^2 - 0.4537.\Phi^3 + \\ + 0.0384.\Phi^4 - 0.0017.\Phi^5 + 0.00003.\Phi^6 \qquad [\text{segundos}] \qquad (2.3)$$

Estas equações são apenas representativas, uma vez que não relacionam todas as grandezas físicas que contribuem para a variação do tempo de combustão.

Por outro lado, sob o aspecto da estrutura da chama, de maneira geral, a mesma pode ser dividida nas seguintes zonas:

a) zona de pré-aquecimento;

b) zona de reação; e

c) zona de produtos.

A Figura 2.16 ilustra estas três zonas, apresentando: o comportamento da temperatura na frente de chama; das concentrações de oxidante no ar [O_2], combustível [F], radicais livres e produtos; e da Taxa de Reação $d[F]/dt$, que depende da concentração inicial do oxidante e do combustível, bem como da temperatura inicial T da mistura e da energia de ativação **Ea** Mais detalhes podem ser encontrados em Williams (1985) e nos trabalhos de Shibahara e Katsuki (2006).

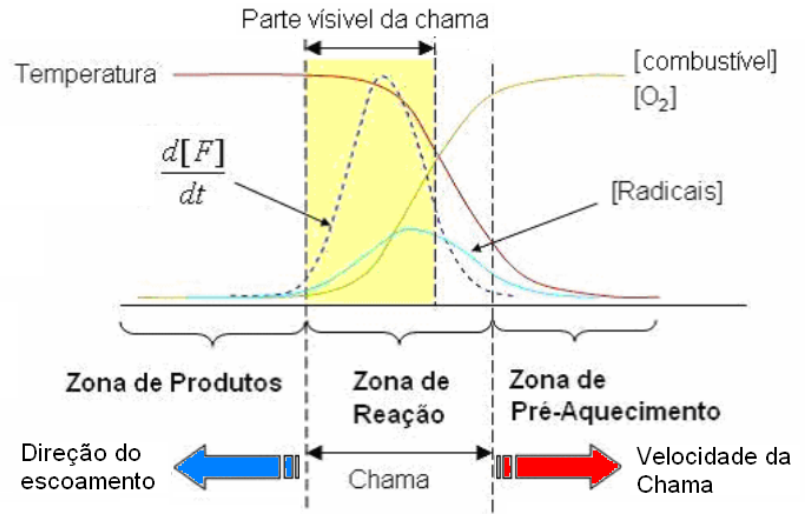


Figura 2. 16 Estrutura da chama com escoamento turbulento, Williams (1985)

Na Figura 2.16, identifica-se que a zona de pré-aquecimento é aquela afetada pela transferência de calor por radiação em torno da zona de reação e no lado de injeção da mistura ignitável, sendo também afetada pela natureza do escoamento secundário no meio. Conseqüentemente, é o local onde a chama encontra-se "ancorada" ao injetor, dependendo do equilíbrio entre a velocidade de propagação da chama e a velocidade.do escoamento da mistura.

A zona de reação é aquela onde a combustão se realiza. Pode ser dividida ainda em duas regiões distintas:

a) Região de pré-mistura; e

b) Região de luminescência.

A região de pré-mistura varia muito em tamanho, de chama para chama, em função da geometria do injetor e das condições de mistura do oxidante e combustível. Sua posição é envoltória em relação à zona de luminescência. É o local onde o combustível pode ser gaseificado e formar radicais livres.

A zona de luminescência também varia em tamanho em função das condições da mistura entre oxidante e combustível. É o local onde ocorre maior transferência de calor por radiação. Conseqüentemente, é o local onde a chama atinge as maiores temperaturas.

A coloração da zona de luminescência pode assumir cores azul e amarela, porque a alta temperatura da chama pode aproxima-se da temperatura necessária para excitar os elétrons das moléculas da mistura ignitável para um nível de energia eletromagnética (radiação) maior e equivalente ao comprimento de onda e/ou freqüência do espectro da luz azul (baixas frequências) ou amarela (altas frequnêcia), conforme a Lei da Radiação de Corpo Negro de Planck, Lefebvre (1983), Williams (1985) e Kuo (1986).

2.5 Caracterização da Transferência de Calor

Nas câmaras de combustão para micro turbinas a gás, o processo de transferência de calor se realiza de forma semelhante das turbinas a gás maiores. Basicamente, a transferência de calor pode se caracterizada conforme as seguintes partes:

a) Radiação entre o gás quente e a mistura ar / combustível nas proximidades dos injetores;

b) Radiação entre o gás quente e as paredes laterais do tubo de chama;

c) Convecção entre o gás quente e o ar dos orifícios laterais do tubo de chama;

d) Condução de calor pelas paredes do tubo de chama;

e) Convecção de calor para o ar entre carcaça e tubo de chama; e

f) Radiação entre tubo de chama e carcaça.

A Figura 2;17 apresenta um esquema básico da transferência de calor em câmara de combustão, segundo Lefebvre (1983).

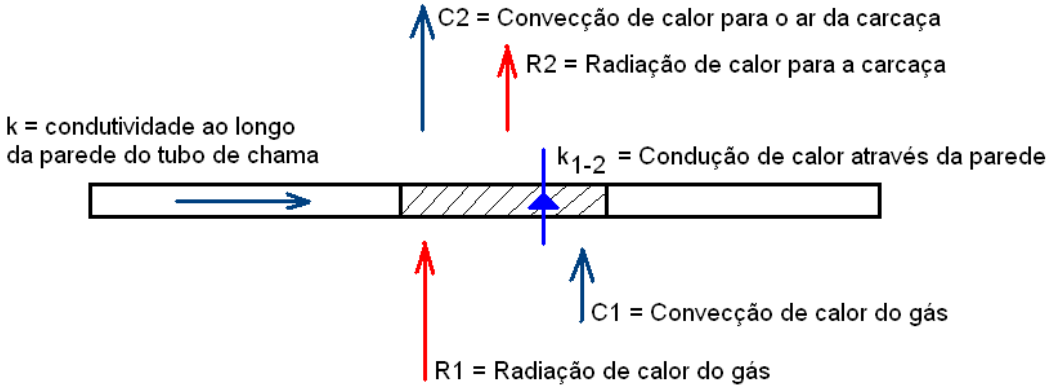


Figura 2. 17 Esquema da transferência de calor em câmaras de combustão, Lefebvre (1983)

A Figura 2.17 ilustra o processo de transferência de calor com variação axial das propriedades. Todas as propriedades são consideradas serem constantes em torno da circunferência transversal em qualquer local axial da câmara de combustão.

Sob condições de regime permanente, a taxa de transferência de calor no elemento da parede é dada por um balanço (equilíbrio) dos fluxos de calor, como dado pela equação:

$$(R_1 + C_1 + k).\Delta A_{w1} = (R_2 + C_2).\Delta A_{w2} = k_{1-2}.\Delta A_{w1} \qquad (2.4)$$

Onde $\mathbf{k_{1\text{-}2}}$ é também definido como o Coeficiente de Transferência de Calor.

O coeficiente de condutividade das paredes, k, normalmente pode ser desprezado em face da pequena espessura das paredes e de seu valor ser comparativamente pequeno se

comparado aos valores de transferência de calor por radiação e convecção. Desta forma, vale a identidade: $\Delta A_{w1} \approx \Delta A_{w2}$

Na equação 2.4, a **Radiação Interna R_1** do tubo de chama, é a componente mais afetada pela mudança no tipo de combustivel, sendo dada pela equação semi-empírica:

$$R_1 = 0.5.\sigma.\left(1+\varepsilon_W\right).\varepsilon_G.T_g^{1.5}.\left(T_g^{2.5} - T_W^{2.5}\right) \qquad [W/m^2] \qquad (2.5)$$

Onde **σ** é a constante de Stefan Boltzmann; **ε_W** é a emissividade da parede do tubo de chama; **ε_G** é a emissividade do gás; **T_g** é a temperatura absoluta do gás; **T_W** é a temperatura absoluta da parede.

Na equação 2.5, a temperatura do gás **T_g** corresponde à soma da variação da temperatura devido à combustão, função da razão ar / combustivel, e a temperatura do gás na entrada de ar. A emissividade do gás **ε_G** para combustíveis hidrocarbonetos depende da razão ar / combustivel, do volume e da forma do gás quente, e da luminosidade como função da razão carbono / hidrogênio no combustivel.

Na equação 2.4, a **Radiação Externa R_2** das paredes do tubo de chama para a carcaça externa, é a componente mais afetada pela razão entre a área superficial da parede externa do tubo de chama e da parede interna da carcaça, sendo dada pela equação semi-empírica:

$$R_2 = \sigma.\left[\frac{\varepsilon_W.\varepsilon_C}{\varepsilon_C + \varepsilon_W.\left(1-\varepsilon_C\right).\dfrac{A_W}{A_C}}\right].\left(T_W^4 - T_3^4\right) \qquad [W/m^2] \qquad (2.6)$$

Onde **ε_C** é a emissividade da parede da carcaça; **T_3** é a temperatura do ar na entrada do anular ou tubo de resfriamento; e A_W/A_C representa a razão entre os diâmetros da parede do tubo de chama e da parede da carcaça. Este parâmetro depende do tipo de câmara de combustão. No caso de câmaras de combustão do tipo anular, esta razão pode variar entre 0.90 a 1.10. Os valores maiores do que a unidade referem-se à parede interna do tubo de chama, enquanto os valores menores do que a unidade referem-se à parede externa do tubo de chama.

Dos quatro processos de transferência de calor, que juntos determinam a temperatura no tubo de chama pela equação 2, a **Convecção Interna C_1** é o componente mais difícil para estimar com precisão. A razão para isso está no fato de que na zona primária, os gases envolvidos apresentam temperaturas muito altas o suficiente para alterar as propriedades

físico-químicas do fluido de trabalho, incluindo a distribuição de velocidade, pressão e temperatura.

Dados experimentais permitem relacionar a dependência da convecção de calor em relação à natureza do escoamento, sendo a mesma representada pela seguinte equação semi-empírica:

$$C_1 = 0.017.\left(\frac{k_G}{D_L^{0.2}}\right).\left(\frac{\dot{m}_{PZ}}{A_L.\upsilon_G}\right)^{0.8}.\left(T_G - T_W\right) \qquad [W/m^2] \qquad (2.7)$$

Onde $\mathbf{k_G}$ é a Condutividade Térmica do gás; $\mathbf{D_L}$ é o diâmetro interno do tubo de chama; $\dot{m}_{PZ}$ é a vazão mássica de ar na zona primária; $\mathbf{A_L}$ é a área transversal do tubo de chama; e $\boldsymbol{\upsilon_G}$ é a viscosidade cinemática do gás.

E, finalmente, a **Convecção Externa C_2** existente entre o tubo de chama e a carcaça, depende do escoamento do ar advindo do compressor e das áreas para troca de calor, sendo representada pela seguinte equação:

$$C_2 = 0.020.\left(\frac{k_{Ar}}{D_{AN}^{0.2}}\right).\left(\frac{\dot{m}_{AN}}{A_{AN}.\upsilon_{Ar}}\right)^{0.8}.\left(T_W - T_3\right) \qquad [W/m^2] \qquad (2.8)$$

Onde k_{Ar} é a Condutividade Térmica do ar $\mathbf{D_{AN}}$ é o diâmetro do anular ou câmara de resfriamento; $\dot{m}_{AN}$ é a vazão mássica de ar no anular; $\mathbf{A_{AN}}$ é a área transversal do anular; e $\boldsymbol{\upsilon_{Ar}}$ é a viscosidade cinemática do ar.

2.6 Caracterização das Emissões

Como citado no item 2.4, os principais agentes poluentes emitidos por micro turbinas a gás e turbinas a gás são: óxidos de nitrogênio (NOx), monóxido de carbono (CO) e os hidrocarbonetos não queimados (UHC), além de particulados e compostos orgânicos voláteis (VOC). Contudo, no caso de micro turbinas a gás e turbinas a gás que utilizem gás natural como combustível, as emissões dos elementos particulados são muito pequenas e podem ser desprezados.

O monóxido de nitrogênio (NO) é o elemento mais predominante das emissões, porque resulta diretamente de altas temperaturas do processo de combustão incompleta. Conseqüentemente, este elemento ao oxidar-se na atmosfera, além de formar o dióxido de nitrogênio (NO_2), é também precursor da destruição da camada de ozônio.

O monóxido de carbono (CO) é formado a partir da combustão incompleta do carbono do combustível e é tóxico, enquanto que a emissão dos hidrocarbonetos não queimados é menor, conforme aumenta a temperatura da chama, Eli Eber (2003).

No caso particular no monóxido de enxofre (SOx), o mesmo é tóxico e formador das chuvas ácidas, Lefebvre (1995).

As emissões de micro turbinas a gás são muito menores do que qualquer outra tecnologia devido à combustão contínua, o que permite uma queima mais completa. As Tabelas 2.3 e 2.4 apresentam alguns valores típicos de emissões de micro turbinas da Capstone e da Volvo, e comparação dos níveis de emissões entre micro turbinas a gás, turbinas a gás e motores alternativos de combustão interna, respectivamente.

Tabela 2. 3 Emissões das micro turbinas a gás da Capstone e da Volvo, Eli Eber (2003)

Modelo de Micro turbina	Potência Nominal (ISO) [1]	Emissão de NOx (15 % O_2)
Capstone M60 (combustível gasoso)	60 kW	< 9 ppm
Capstone M330 (combustivel líquido)	29 kW	< 35 ppm
Capstone M330 (biogás)	30 kW	< 9 ppm
Volvo Aero T100 (gás natural)	100 kW	15 ppm

Nota: [1] Condição ISO (Pressão 1 [atm],temperatura 15 [°C])

Tabela 2. 4 Comparação das emissões de micro turbinas a gás, turbinas a gás e motores alternativos de combustão interna, Eli Eber (2003)

Tecnologia	Potência (ISO) [1] [kW]	Níveis de Emissão (valores em ppm / 15% O_2)		
		NOx	CO	UHC
Micro turbina Capstone M330 (gás natural)	30	9	40	9
Outras Micro turbinas (gás natural)	45 -- 75	9 – 25	25 – 240	25
Turbinas a Gás Industriais (gás natural)	800 – 11000	6 – 140	1 – 462	6 – 559
Motor Alternativo de Combustão Interna	170 – 1500	30 – 3214	325 – 833	2747
Motor Alternativo de Combustão Interna	35	Não divulgado	244 -- 378	31 -- 454

Nota: [1] Condição ISO (Pressão 1 [atm],temperatura 15 [°C])

Segundo Lefebvre (1995), existem basicamente três mecanismos para a formação do NOx, a saber:

a) NOx Térmico de Zeldovich: consiste na formação do NOx a partir da dissociação do nitrogênio atmosférico durante a combustão de combustíveis que não possuem nitrogênio em sua composição química, Siegel e Howell (1992). Realiza-se na temperatura de combustão superior a 1800 ± 50 [K] com as seguintes reações em cadeia:

$$N_2 + O \leftrightarrow N + NO$$

$$N + O2 \leftrightarrow NO + O$$

$$N + OH \leftrightarrow NO + H$$

b) NOx Prompt de Fenimore: consiste na formação do NOx a partir da reação do nitrogênio molecular com fragmentos de hidrocarbonetos na região da chama, para temperaturas inferiores à 1800 ± 50 [K] com as seguintes reações em cadeia, Dupont e Williams (1998) e Fenimore *et al*. (1987):

$N_2 + CH \leftrightarrow HCN + N$

$N_2 + CH_2 \leftrightarrow HCN + NH$

c) NOx do Combustível: consiste na geração do NOx a partir da reação dos combustíveis que contenham um ou mais átomos de nitrogênio, sendo uma reconhecida fonte de óxido nítrico e dos radicais livres NH_3, NH_2, NH, e CN, Cozzi e Coghe (2006).

A Figura 2.18 apresenta as curvas características das emissões de NOx e CO em relação à variação da temperatura da chama.

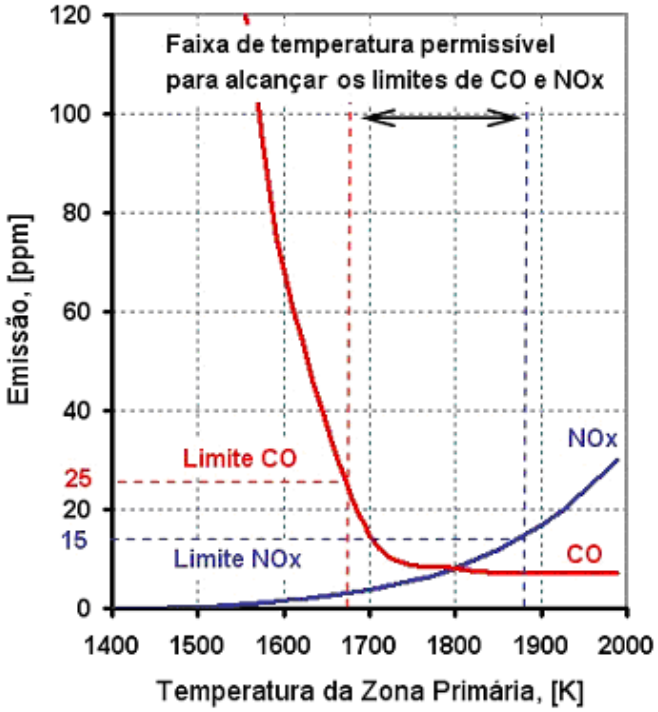


Figura 2. 18 Concentrações de NOx e CO típicas em câmaras de combustão tubulares, Lefebvre (1995)

Da Figura 2.18, observam-se dois limites de temperatura 1680 [K] e 1890 [K], que correspondem às emissões máximas regulamentadas pela EPA (1993), ou seja, 25 [ppm] para o CO e 15 [ppm] para o NOx, respectivamente, para turbinas a gás.

A região delimitada por ambas temperaturas é definida como Zona de Trabalho das Câmaras de Combustão, a qual tem servido como referência para os fabricantes de turbinas a gás.

Além disso, pode-se ainda extrair duas equações úteis para prever a emissão do NOx e CO em unidades de massa do combustível em função da temperatura da chama, pelas equações abaixo, lembrando que 1 [ppm] equivale a 0,001 [g/kg combustível].

$$[\mathrm{NOx}] = 1.244 - 3.3615.10^{-3}.\mathrm{Tc} + 3.4165.10^{-6}.\mathrm{Tc}^2 - \\ - 1.5504.10^{-9}.\mathrm{Tc}^3 + 2.6552.10^{-13}.\mathrm{Tc}^4 \qquad [\text{g/kg combustível}] \qquad (2.9)$$

$$[\mathrm{CO}] = 141.016 - 0.3002.\mathrm{Tc} + 2.3949.10^{4}.\mathrm{Tc}^2 - \\ - 8.4857.10^{-8}.\mathrm{Tc}^3 + 1.1268.10^{-11}.\mathrm{Tc}^4 \qquad [\text{g/kg combustível}] \qquad (2.10)$$

As emissões destes elementos na exaustão dependem de três fatores básicos, Lefebre (1995):

- Tempo de residência Referencial do escoamento na zona primária, dada por:

$$\text{Tempo de Residência Escoamento} = \frac{L}{U} \propto \frac{P.Vc}{m_a.T} \qquad (2.11)$$

- Taxas de reação química, dada por:

$$\text{Taxa de Reação} \propto P^n.\exp(\alpha.T) \qquad (2.12)$$

- Taxa de mistura, dada por:

$$\text{Taxa de Mistura} \propto \left(\frac{\Delta P}{P}\right)^x \qquad (2.13)$$

Onde **L** é o comprimento do tubo de chama; **U** é a velocidade do escoamento média do ar no tubo de chama; **Vc** é o volume do combustor; **P** é a pressão do gás; **T** é a temperatura absoluta do gás; ma é a vazão mássica do ar; **ΔP** é a perda de carga no tubo de chama; e **α**, **n** e **x** são constantes determinadas experimentalmente.

Atualmente, o projeto das turbinas a gás e micro turbinas a gás segue os regulamentos definidos pela EPA (1993), afim de não violar os limites estabelecidos paras as emissões dos poluentes em geral. Existem basicamente três técnicas de controle de emissões para turbinas a gás e micro turbinas a gás, como menciona Lefebvre (1995):

a) Injeção de água ou vapor: é restrita à médias faixas de emissão, entre 25 [ppmv] a 45 [ppmv] para o caso do gás natural, e entre 42 [ppmv] a 75 [ppmv] para o caso dos óleos combustíveis. Apresenta custo relativamente alto, porque: necessita ter um sistema de tratamento na água. A admissão de água pode compromete a eficiência energética na turbina com a diminuição da temperatura dos gases;

b) Aplicação de câmara do tipo DLN ("Dry Low NOx"): é restrita à emissão entre 9 [ppmv] a 25 [ppmv] para o caso do gás natural em turbinas de grande potência, e entre 25 [ppmv] a 42 [ppmv] para o caso dos óleos combustíveis em turbinas de baixa potência. Contempla o uso de pré-misturas de oxidante e combustível, com dosagem fracionada de oxidante para diferentes estágios de combustão. Atende tanto às câmaras do tipo tubular, quanto do tipo anular;

c) Redução catalítica: é restrita à emissão entre 25 [ppmv] a 42 [ppmv] para o caso do gás natural e, no mínimo, 18 [ppmv] para os óleos combustíveis. Contempla a injeção de amônia (NH_3) e de um redutor catalítico, geralmente metálico, numa faixa de temperatura entre 260 [°C] e 400 [°C] com a finalidade de reduzir NH_3 e NOx para as formas N_2 e H_2O. Permite realizar combustão em baixas temperaturas (da oirdem de 1100 [K]), contudo, apresenta o inconveniente de diminuir a potência gerada pela turbina em 0.5 [%] da potência nominal; e

d) Redução Catalítica Selectiva (RCS ou SRC): é um processo de controle de emissões pós-combustão, que utiliza materiais porosos feitos em cobalto/silicio e/ou ferro/silicio, também conhecidos como zeolitos. Amônia é injetada nos gases de exaustão antes deles passarem por um catalizador. É restrito às emissões inferiores a 25 [ppmv].

2.7 Pespectivas Tecnologicas

No contexto tecnológico, a busca por equipamentos de maior eficiência norteia as pesquisas de desenvolvimento de novas micro turbinas a gás pelos fabricantes.

De todos os elementos que afetam a eficiência da micro turbinas a gás, destacam-se: a turbina radial; o material utilizado nos componentes; e as câmaras de combustão.

A turbina radial tem como características operacionais a sua baixa eficiência e a dificuldade para o resfriamento de suas pás.

Deste modo, os avanços relacionados com o aumento da temperatura na entrada da turbina dependem diretamente dos avanços nas tecnologias dos materiais. Estas dificuldades fazem com que as turbinas em ciclo simples não consigam alcançar eficiência superior a 17 [%]. A tendência nos avanços tecnológicos das micro turbinas é que já existe um crescente aumento do rendimento com a modificação das características construtivas e dos materiais dos componentes.

Nas Figuras 2.19 e 2.20, são mostradas as diferentes alterações que deverão sofrer as micro turbinas para elevar sua eficiência e como estas devem evoluir com os avanços

tecnológicos esperados. A curva de evolução é indicada pelos números de 1 a 5, cada um assinalando um diferente tipo de tecnologia. O objetivo de longo prazo previsto para 2010 (ponto 5) corresponde às micro turbinas a gás de 25 a 50 [kW] com eficiência próxima de 50 [%], temperatura na entrada das turbinas próxima de 1800 [K], consumo específico de combustível de 160 [g/ kWh] e potência específica próxima de 375 [kW/ (kg/s)].

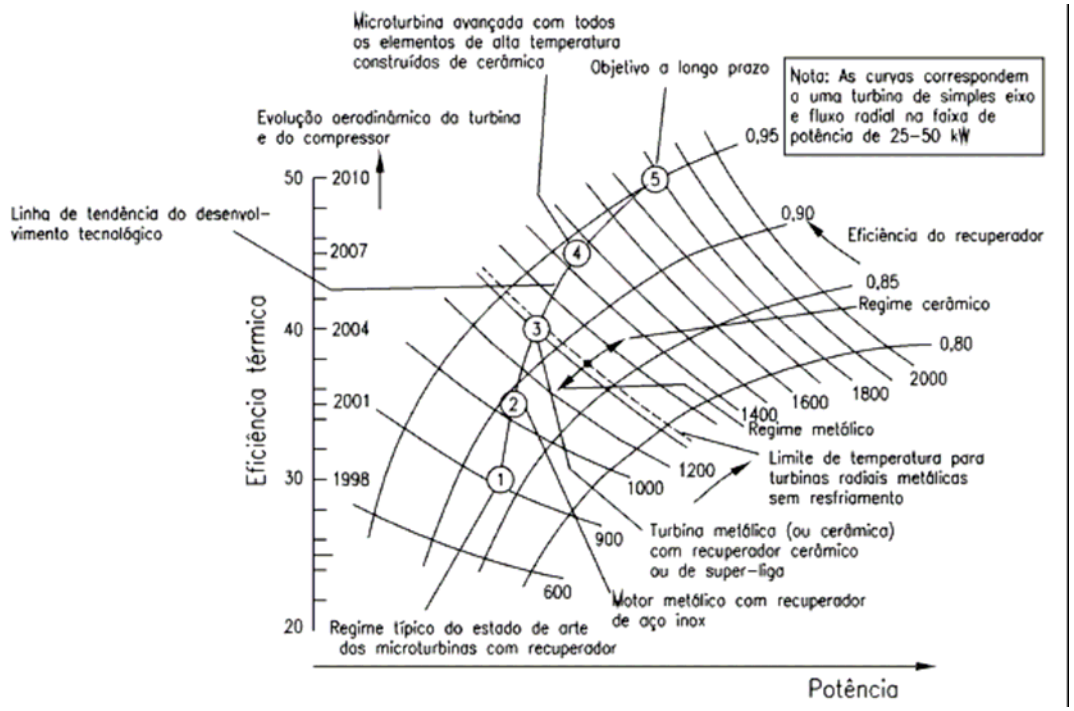


Figura 2. 19 Evolução esperada para a eficiência das micro turbinas, Massardo et al. (2000)

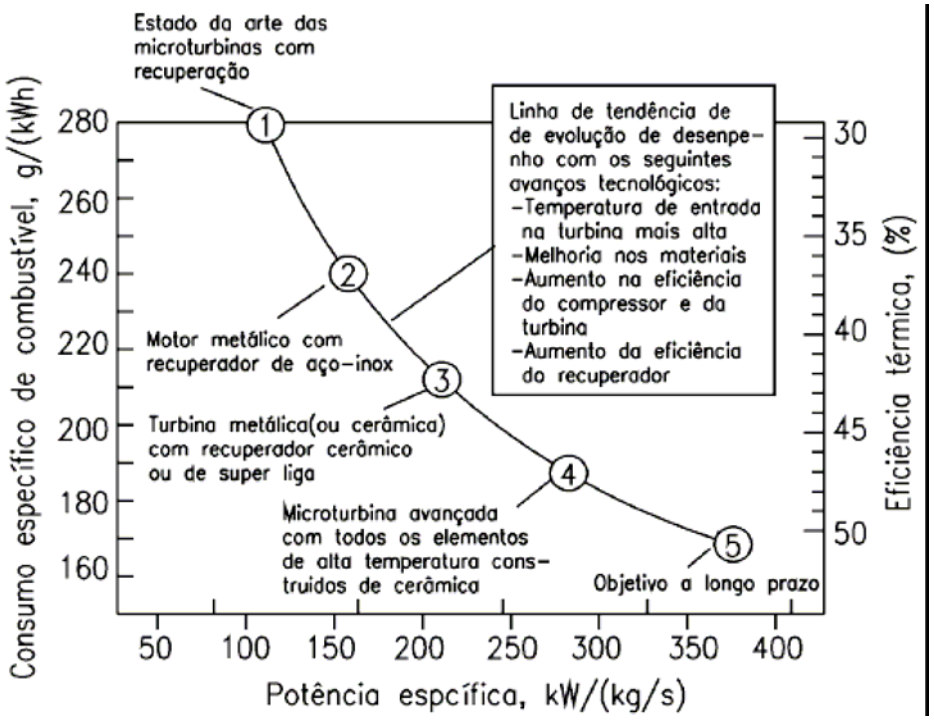


Figura 2. 20 Expectativas de volução no desenvolvimento das micro turbinas, Massardo et al. (2000)

Com base nos trabalhos de Stickles *et al* (1993), Lefebvre (1995), Allen (1998), Melick e Kersh (1999), e Wakabayashi *et al* (2002), algumas melhorias têm sido propostas também para as câmaras de combustão, buscando à maximização da eficiência da combustão e a minimização da emissão de poluentes. Entre estas melhorias, destacam-se:

- Uso de emulsificadores: Allen (1998) explora as câmaras do tipo DLN ("Dry Low NOx") usando combustíveis produzidos com emulsificadores, ou seja, aditivos líquidos que facilitam a atomização e a reatividade dos mesmos;
- Modificação da Geometria dos Injetores: Stickles *et al* (1993) apresenta as modificações sugeridas pelo Centro de Propulsão Aéreo e Naval dos EUA que realizou testes em 27 tipos de injetores, a saber:
    - Redução da seção de passagem do combustível para aumentar a velocidade do seu escoamento, bem como a diminuição da temperatura na interface fluido e estrutura;
    - Adição de aberturas laterais de ar no tubo de chama;
    - Substituição de algumas partes metálicas por materiais cerâmicos para diminuir o efeito da fluência; e
    - Diminuição de curvas nos tubos de alimentação do injetor para ar e combustível;
- Adoção de um Sistema de Controle Distribuído de Combustível: Breikin *et al*. (2006) propõe um sistema baseado em múltiplos pontos de ignição para uniformizar o inicio e a continuidade da combustão, com um controle sincronizado de acionamento do Sistema de Ignição em várias câmaras de combustão no mesmo instante de tempo; e
- Projeto de Câmaras de Combustão ULN ("Ultra Low Nox"): consistem em câmaras dotadas de um injetor multi-jato, que pulveriza o combustível em multi pontos da câmara, unidos a partir de um tubo de alimentação de combustível comum e um "swirler" de ar, cujo escoamento rotativo permite promover uma rápida pré-mistura do combustível com ar na zona de combustão, como mostra a Figura 2.21. Esta tecnologia permite diminuir a emissão de NOx para patamares entre 3 a 12 [ppmv] usando gás natural, fabricante COEM (http://www.coen.com).

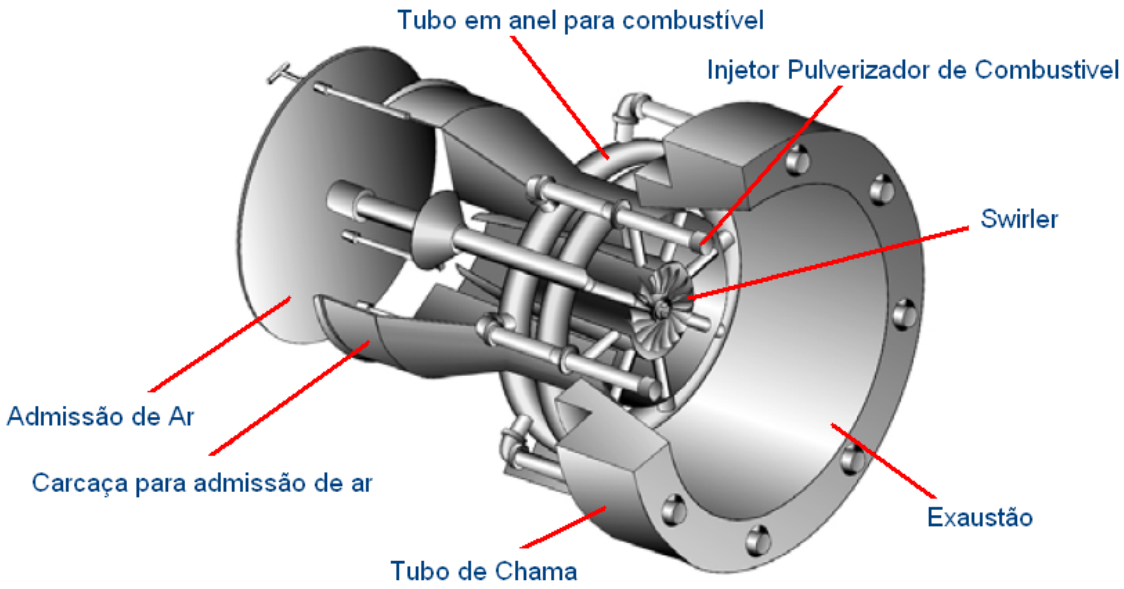


Figura 2. 21 Câmara de combustão ULN, fabricante COEM, http://www.coen.com

Desta forma, após expor no presente capítulo as principais características operacionais e tecnológicas das micro turbinas a gás, destacando um tipo de câmara de combustão selecionada para a realização dos estudos de simulação no presente trabalho e conceituando os processos de combustão, transferência de calor e emissão, o próximo capítulo apresenta o processo de modelagem da câmara de combustão, utilizando a Dinâmica de Fluido Computacional (CFD), bem como os modelos matemáticos que podem ser aplicados.

Capítulo 3

A DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL APLICADA ÀS CÂMARAS DE COMBUSTÃO

Apresenta-se neste capítulo a metodologia da Dinâmica de Fluido Computacional (CFD), descrevendo suas características funcionais e limitações, bem como os modelos matemáticos utilizados para a simulação do escoamento turbulento, da combustão, da transferência de calor por radiação, que permitem realizar os estudos termo - aerodinâmicos sobre câmaras de combustão para micro turbinas a gás e turbinas a gás no capítulo 4.

3.1 Generalidades

3.1.1 Processo de Modelagem e Simulação

Modelagem é o emprego de modelos (físicos ou matemáticos) para descrever um sistema, maquina, entre outros. As formulações matemáticas utilizadas normalmente possem o formato diferencial, podendo ser descritas por variáveis com domínio no espaço e no tempo.

Estas equações nem sempre possuem solução analítica. Para obter a solução aproximada destas equações, é necessária a utilização de métodos de discretização, que consistem basicamente em transformar as equações diferenciais em um sistema de equações algébricas, as quais podem ser então resolvidas empregando-se computadores.

As aproximações são aplicadas em domínios discretos no espaço e no tempo, de forma que a solução numérica e/ou simulação providencie resultados em locais discretos no espaço e

no tempo. Esta é a essência dos métodos numéticos denominados como Eulerianos. Quanto melhor a qualidade desta discretização espaço-temporal adotada, maior será a precisão da solução numérica empregada.

Neste contexto, o campo das soluções numéricas é bastante amplo e diversificado, Ferziger *et al.* (1999). Entre as técnicas de soluções numéricas que permitem discretizar o dominio físico em um sistema de equações algébricas no espaço e no tempo, destaca-se a Dinâmica de Fluido Computacional (CFD), a qual é descrita no próximo item.

De maneira simplificada, os processos de modelagem e simulação podem ser representados pelo seguinte fluxograma:

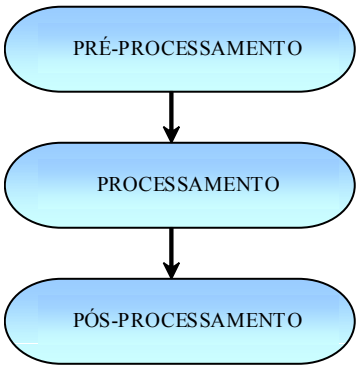


Figura 3. 1 Esquema básico da modelagem e da simulação

O **Pré-Processamento** engloba:

a) Definição da geometria e da malha de discretização do problema;

b) Definição do Domínio (fluido, escoamento, transferência de calor, reações químicas e tempo);

c) Estabelecimento das Hipóteses; e

d) Definição das Condições de Contorno Iniciais e de Convergência.

O **Processamento** contempla a resolução das equações de conservação utilizando um algoritmo de pressão-velocidade de forma iterativa dentro de um "loop" até atingir o resíduo mínimo, o qual é definido pelas condições de convergência.

E o **Pós-Processamento** é responsável pela visualização (análise) dos resultados.

A modelagem e a simulação evoluíram quanto à precisão e robustez junto com o desenvolvimento de computadores mais rápidos e com maior capacidade de armazenamento de dados, tornando possível a análise tridimensional de fenômenos físicos complexos de forma mais rápida e menos onerosa comparativamente aos testes experimentais.

Desta forma, é possível analisar fenômenos físico-químicos diversos, contribuindo para um significativo salto tecnológico na industria em geral, seja nos ramos: aeroespacial,

petroquímico, sistemas hidráulicos, sistemas térmicos, biociências, combustão, energia nuclear, meteorologia, nanotecnologia, inteligência artificial, entre outros.

3.1.2 Dinâmica de Fluido Computacional

Entende-se Dinâmica de Fluidos como a ciência que estuda o movimento de fluidos. As equações básicas que governam o movimento de fluidos são bem conhecidas há mais de 150 anos e possuem o formato de equações diferenciais para a Massa, Quantidade de Movimento e/ou Navier Stokes e Energia, as quais governam o movimento de um fluido viscoso com ou sem transferência de calor. A simplificação destas equações (obtenção da forma algébrica) depende de quais efeitos são significativos em cada caso e do regime de trabalho, Shaw (1992).

Métodos numéricos, por outro lado, são conhecidos desde o tempo de Newton em 1700, contemplando métodos para solucionar Equações Diferenciais Parciais (PDE) quanto integrais. Basicamente, existem duas vertentes de modelos utilizados para a análise do movimento de fluídos: Modelo de Lagrange e Modelo de Euler.

A Dinâmica de Fluido Computacional (CFD) abrange basicamente três métodos numéricos baseados no Modelo de Euler para o escoamento: a) Método de Diferenças Finitas; b) Método de Elementos Finitos; e c) Método de Volumes Finitos.

O Método de Diferenças Finitas (MDF) consiste em uma forma diferencial para resolver as PDE`s. Este método foi concebido em 1910 por Richardson na Royal Society of London. Cada derivada é definida como uma formula diferencial aproximada (a qual geralmente advém de uma expansão em serie de Taylor até a segunda ordem). O domínio computacional é usualmente representado por uma malha do tipo estruturada formada por elementos hexaédricos, e a solução é obtida para cada nó (vértice) dos elementos desta malha, Morton e Mayers (2005).

O Método de Volume Finito (MVF) consiste em uma formulação analítica de elementos de volume de controle para descrever a dinâmica de fluidos, que emprega um algoritmo de pressão-velocidade.

Entre os muitos algoritmos de pressão velocidade, destaca-se SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation), o qual permite acoplar e resolver as equações de Navier Stokes discretizadas, obtendo num mesmo passo de tempo informações sobre as variáveis termo - aerodinâmicas, que caracterizem o fenômeno físico em estudo (pressão, velocidade e temperatura).

Segundo Chung (2002), o MVF pode ser aplicado no estudo de escoamentos reativos, utilizando as equações das espécies juntamente com um modelo de reação turbulenta ou laminar, como é feito na solução do termo fonte da equação das espécies (ver equação 3.1).

A vantagem básica do MVF em relação ao MDF é não requerer o uso restrito de malhas estruturadas, que são formadas por quadriláteros ou hexaedros não alinhados aos eixos principais, como os que aparecem em grades esféricas ou curvilíneas. Desta forma, utilizando malhas não-estruturadas, que contém polígonos ou poliedros sem qualquer padrão explícito de conectividade, este método também tem a capacidade de trabalhar com geometrias mais complexas, contendo pequenas saliências e/ou reentrâncias, graças também ao fato do cálculo das variáveis poder ser realizado nos nós localizados no meio dos elementos por interpolação.

Atualmente, existe uma forma alternativa do MVF conhecida como Método de Volume Finito Espectral (MVFE), que consiste em um MVF de maior ordem para resolver as componentes hiperbólicas das equações de conservação em malhas não estruturadas, utilizando um Método de Godunov para resolver o termo de convecção das PDE`s. Maiores detalhes sobre o MVFE são encontrados em Hirsch (1990).

O Método de Elementos Finitos (MEF) representa uma classe do Método de Galerkin. Foi concebido por Turner, Clough, Martin e Topp na Aeronautical Science Journal em 1956. O domínio computacional é dividido por um número finito de elementos e a solução em cada elemento é construída a partir de funções base, que permitem substituir as PDE`s por equações no formato matricial, Segerling (1984).

Segundo Chung (2002), existem diferenças e analogias entre estes três métodos, independentemente da geometria do problema em estudo, a destacar:

a) MDF apresenta facilidade de formulação, cuja malha deve ser do tipo estruturada para todos os casos, providenciando soluções discretas. Nas geometrias com superficies curvas, as malhas das curvas devem ser transformadas em coordenadas cartesianas ortogonais de forma que a equação de diferença finita pode ser implementada. A condição de contorno de Neumann, onde se impõe uma condição de contorno do tipo diferencial (**du/dx**), pode somente ser aproximada para cada um dos nós da malha;

b) MEF requer um rigor matemático maior do que o MDF para ser utilizado em geometrias mais complexas com malha não estruturada, sem a necessidade de transformação de coordenadas tal como no MDF. Providencia soluções continuas; e

c) MVF pode apresentar formulação baseada no MEF e no MDF, sendo que as propriedades de conservação ao longo do domínio geométrico são preservadas devido à

integração dos fluxos normais às superfícies. Providencia soluções discretas, utilizando malhas não-estruturadas para geometrias complexas.

De maneira geral, o cálculo DFC ou CFD pode apresentar as seguintes vantagens:

a) Reduz os ensaios experimentais em laboratório;

b) Visualização detalhada de resultados na forma de animações e imagens tridimensionais, que possibilitam uma capacidade incomparável de compreensão e análise dos fenômenos físicos; e

c) Satisfatória precisão e confiabilidade nos resultados, dependendo do caso em estudo.

Atualmente, existem diversos softwares que utilizam os recursos do cálculo CFD aplicados na indústria. Entre estes softwares, que permitem a visualização e a modelagem bi e tridimensional dos fenômenos físicos relacionados à combustão, por exemplo, destacam-se:

a) ANSYS CFX ® da ANSYS Corporation;

b) FLUENT ® da FLUENT Company;

c) STAR-CD ® da CD ADAPCO;

d) FLOW 3D ® da FLOW SCIENCE;

e) STORM CFD 2000® da ADAPTIVE Company; e

f) GASP ® da AEROSOFT.

No presente trabalho, a modelagem e a simulação da câmara de combustão é efetuada usando o software CFX v. 5.7® baseado no Método de Volume Finito.

3.2 Equacionamento do Problema Físico

3.2.1 Equações de Transporte das Espécies, Quantidade de Movimento e Energia para a Combustão utilizadas pelo CFX

As hipóteses que podem ser adotadas de modo geral, que permitem obter resultados numéricos satisfatórios sobre o comportamento do escoamento e da chama para câmaras de combustão, são as seguintes, Chung (2002):

- **Fluido**

a) O fluido reativo pode tratar-se como um meio contínuo e homogêneo;
b) O fluido pode ser regido pela Lei de Gás Ideal;
c) O fluido pode ser uma mistura de espécies químicas com mesma fase (líquido ou gás ou sólido);
d) A difusividade de massa para todas as espécies é conservada; e
e) Ausência de fuligem (particulados advindos da combustão incompleta).

- **Escoamento**

a) Regime não permanente;
b) Compressível; e
c) Turbulento.

- **Energia**

a) Os calores específicos à pressão constante e volume constante são constantes;
b) Considera-se que os efeitos convectivos sejam pequenos;
c) Despreza-se a perda de calor para o meio externo – superfícies metálicas adiabáticas.

- **Reação**

a) Número de etapas até 4;
b) Uniforme para combustíveis com baixa taxa de reação; e
c) Paredes não catalíticas, não afetam as reações.

Desta forma, as equações de massa, quantidade de movimento e energia praticadas para misturas pelo CFD são representadas como segue, Chung (2002): No Anexo F, apresenta-se as Equações Difernciais no formato Generalizado para processos de combustão, bem como a descrição das varaiveis físicas relacionadas.

- **Equação de Massa**:

$$\frac{\partial\left(\rho.\widetilde{Y}_I\right)}{\partial t}+\frac{\partial\left(\rho.V_j.\widetilde{Y}_I\right)}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma ref.\frac{\partial\widetilde{Y}_I}{\partial x_j}\right)+S_I \qquad (3.1)$$

De modo geral, o primeiro membro da esquerda representa a variação da fração mássica das espécies químicas **I** na mistura em função do tempo para uma posição fixa; o segundo membro da esquerda significa o efeito convectivo atuante na mistura e em cada espécie química da mistura num certo instante de tempo, respectivamente; e o primeiro e segundo membros da direita compreendem os efeitos de difusão molecular e da reação

química, sendo $\Gamma ref = \Gamma_i + \frac{\mu_t}{Sc_t}$, para Γ_i é o coeficiente de difusão molecular da espécie **i**; $\mathbf{Sc_t}$ é o **Número de Schmidt** para escoamentos com alta escala de turbulência; $\boldsymbol{\mu_t}$ é a viscosidade dinâmica devido à turbulência; $\mathbf{S_I}$ é o termo fonte devido à taxa de reação química envolvida pelo componente **I**, dada por $S_I = \frac{\omega_i}{\rho}$, função da taxa de reação ω_i.

No processo de modelagem da combustão, o temo $\mathbf{S_I}$ é o elemento chave porque representa o termo fonte na equação das espécies, cuja solução é efetuada segundo a **Equação de Kuramoto-Sivashinski**, conforme é mostrado no anexo E, Hamer e Roby (1997).

Desta forma, a determinação do termo $\mathbf{S_I}$ junto com o levantamento do campo de variáveis aerodinâmicas permite realizar a caracterização do comportamento da chama em processos de combustão utilizando o Cálculo da Dinâmica de Fluidos.

- **Equação de Quantidade de Movimento**:

$$\frac{\partial\ (\rho.V)}{\partial\ t} + \nabla \bullet \left[\rho.V \otimes V - \mu.\left(\nabla V + \nabla V^T\right)\right] = -\frac{\partial\ p}{\partial\ x_j} + S_M \qquad (3.02)$$

Onde $\rho = \sum_{\alpha=1}^{Np} r_\alpha . \rho_\alpha$, densidade relativa da mistura; $\mu = \sum_{\alpha=1}^{Np} r_\alpha . \mu_\alpha$, viscosidade dinâmica da mistura; $\mathbf{r_\alpha}$ é a fração volumétrica do fluido $\boldsymbol{\alpha}$ no volume total da mistura; $\mathbf{S_M}$ é a somatória das força do campo gravitacional atuante em cada fluído $\boldsymbol{\alpha}$ na mistura; **V** é a velocidade do escoamento da mistura homogênea.

De modo geral, o primeiro membro da esquerda representa a força específica devido à aceleração no meio; o segundo membro da esquerda representa a força devido às **Tensões de Reynolds** $\rho.V \otimes V$ devido à turbulência; o terceiro membro da esquerda representa a força atuante na deformação no elemento de fluido, devido ao atrito viscoso; e o primeiro membro da direita é a Força específica devido à pressão atuante nos contornos do sistema.

No processo de modelagem dos escoamentos turbulentos, o temo $\rho.V \otimes V$ é o elemento chave, cuja solução pode ser encontrada por diferentes modelos de turbulência, Davidson (2003).

- **Equação de Energia**:

$$\frac{\partial(\rho.H)}{\partial t} - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho.V_j.H\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{N_i}^{N_j} \Gamma_i.h_i.\frac{\partial Y_i}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t}.\frac{\partial h}{\partial x_j}\right) + S_E \qquad (3.3)$$

Onde **H** é a entalpia total, que corresponde à soma da entalpia específica **h** e a energia cinética devido à turbulência; **λ** é o coeficiente de condutividade térmica; μ_t é a viscosidade devido à turbulência; Γ_i representa o coeficiente de difusão molecular; S_E representa a contribuição da energia molecular dos fluidos na mistura; e Pr_t é o Número de Prandtl para escoamentos turbulentos.

De modo geral, o primeiro membro da esquerda representa a energia interna específica no meio devido à variação da temperatura no tempo, para uma determinada posição fixa no meio; o segundo membro da esquerda é a variação da pressão no tempo; o terceiro membro da esquerda é a transferência de calor por convecção; o primeiro e segundo membro da direita representam as energias específicas no meio devido à transferência de calor por difusão da mistura e das espécies; e o terceiro membro da direita é a variação da entalpia específica no meio devido à turbulência.

A seguir, apresentam-se os principais modelos de turbulência, de combustão e de transferência de calor por radiação utilizados pelo CFD na resolução das equações de conservação 3.1 a 3.3.

3.3 Simulação do Problema Físico

3.3.1 Modelos de Escoamentos Turbulentos

No escoamento turbulento, as variações dos valores da pressão e da velocidade do escoamento podem ser consideradas funções estocásticas. Cnsequentemente, a equações 3.01 e 3.2 podem ter três técnicas de soluções aproximadas dadas de formas distintas: RANS, LES e DNS. No Anexo D, apresentam detalhes destas três técnicas.

No presente trabalho, utiliza-se a técnica RANS por se tratar de maior campo de aplicação na engenharia, onde as grandezas físicas características do escoamento (pressão e velocidade, por exemplo) são determinadas com base nos seus valores médios calculados ao longo do domínio físico adotado.

Nesta condição, a solução aproximada das equações diferenciais, citadas no item 3.2.1 para o caso particular da aerodinâmica na câmara de combustão, realiza-se com a aplicação de diferentes modelos de turbulência, com a finalidade de resolver o termo representado pelo **Tensor de Reynolds** ($\rho . V \otimes V$), indicado na equação 3.02, Davidson (2003).

Entre os modelos de escoamentos turbulentos aplicáveis às câmaras de combustão, os trabalhos de Clarke e Wilkers (1989), Lee *et al* (1990), Fuller e Smith (1994), Yadigaroglu *et al* (1998) destacam **k-ε**, **RNG k-ε**, **Modelo de Tensões de Reynolds – RSM** e o **Modelo SST k-ω** (ou **Modelo "Shear-Stress-Transport"**).

A seguir, se apresentam de forma simplificada os modelos de turbulência **k-ε**, **RNG k-ε**, e o **Modelo SST k-ω**.

- **Modelo k-ε**

Este é o modelo de turbulência mais aplicado nos cálculos CFD de escoamentos simples, devido à sua estabilidade numérica, robustez e precisão, permitindo analisar escoamentos em superfícies curvas, isentas de fluidos giratórios localmente, Yadigaroglu *et al*. (1998).

Este é um modelo à duas equações, uma relativa à turbulência, **k**, e a outra relativa a dissipação da energia turbulenta, **ε**. É um modelo capaz de boas previsões e aplicável nos seguintes casos: a) escoamentos com separação da camada limite; b) escoamentos com mudanças na taxa média de cisalhamento; c) escoamentos com fluidos rotativos; e d) escoamentos sobre superfícies curvas.

Por este modelo, o **Tensor de Reynolds** (**Vi . Vj**), pode ser representado pela seguinte expressão na notação indicial:

$$-\rho.(V_I.V_J) = 2.\mu_t.S_{IJ} - \frac{2}{3}.\rho.k.\delta_{IJ} \tag{3.4}$$

Onde δ_{IJ} é a função **Delta de Dirac**; S_{IJ} é **Tensor de Cisalhamento Médio** calculado pela expressão:

$$S_{IJ} = \frac{1}{2}.\left(\frac{\partial V_I}{\partial x_J} + \frac{\partial V_J}{\partial x_I}\right) \tag{3.5}$$

Onde a viscosidade turbulenta μ_t é calculada por:

$$\mu_t = C_\mu . \rho . \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{3.6}$$

Onde:

$$k = \frac{1}{2}.(V_I.V_J) \qquad \varepsilon = \nu.\left(\frac{\partial V_I}{\partial x_J}.\frac{\partial V_J}{\partial x_I}\right) \tag{3.7}$$

Estas expressões satisfazem as seguintes equações de transporte em cada ponto do domínio do escoamento:

$$\frac{\partial(\rho.V_J.k)}{\partial x_J}=\frac{\partial}{\partial x_J}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right).\frac{\partial k}{\partial x_J}\right]+2.\mu_t.S_{IJ}.S_{IJ}-\rho.\varepsilon \tag{3.8}$$

$$\frac{\partial(\rho.V_J.\varepsilon)}{\partial x_J}=\frac{\partial}{\partial x_J}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right).\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_J}\right]+2.C_{\varepsilon 1}.\frac{\varepsilon}{k}\mu_t.S_{IJ}.S_{IJ}-C_{\varepsilon 2}.\rho.\frac{\varepsilon^2}{k} \tag{3.9}$$

Nas equações de transporte acima para este modelo existem cinco coeficientes (**C_μ, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k e σ_ε**), cujos valores praticados normalmente baseados em testes experimentais em camadas limites e em escoamentos isotrópicos são apresentados na Tabela 3.1.

- **Modelo RNG k-ε**

Também conhecido como **Modelo com Renormalização das Equações de Navier Stokes,** este modelo de turbulência foi implementado por Yakhot *et al*. (1992), tratando-se de uma forma melhorada do modelo anterior com a finalidade de ampliar o campo de aplicação, neste caso, contemplando escoamentos em superfícies curvas dotadas de pequenas cavidades e fluidos rotativos localmente, onde as menores escalas e turbulência são importantes.

Concebido pela renormalização das Equações de Navier Stokes, o **Tensor de Reynolds** apresenta o mesmo equacionamento anterior, diferindo-se em relação ao valor dos 5 diferentes coeficientes nas expressões que calculam a turbulência, **k**, e a energia dissipada pela turbulência, **ε**, se comparadas aos valores do modelo anterior, como é apresentado na Tabela 3.1.

Segundo Gosselin *et al*. (2000), o modelo de turbulência **RNG k-e** é satisfatório porque permite rastrear também vórtices de pequenas escalas, os quais passariam desapercebidos pelo modelo **k-ε.**.

Tabela 3. 1 Valores típicos das constantes dos modelos de turbulência

Modelo	C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
k-ε	0,081 a 0,099	1,296 a 1,584	1,73 a 2,11	0,95 a 1,05	1,26 a 1,34
RNG k-ε	0,076 a 0,094	$1{,}42-\frac{\eta.\left(1-\frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1+\beta.\eta^3}$	1,51 a 1,85	0,61 a 0,83	0,65 a 0,79

Na Tabela 3.1, os parâmetros **η_0** e **β** possuem os seguintes valores: η_0 = 4,38 e β = 0,015.

O parâmetrp **η** pode ser dado pela seguinte equação:

$$\eta=\left(\frac{k}{\varepsilon}\right).(2.S_{IJ}.S_{IJ})^{1/2} \tag{3.10}$$

No anexo D, apresenta-se a teoria e o equacionamento utilizado para a dedução do modelo de turbulência **RNG k-ε**.

- **Modelo SST k-ω**

Em relação aos modelos anteriores, este modelo tem sido utilizado para descrever escoamentos onde ocorre a separação de camada limite ou a inversão de escoamento, sujeitos a gradientes de pressão adversos, os quais podem ser encontrados nos projetos aerodinâmicos das asas de aviões ou perfis e/ou palhetas de turbo-máquinas.

Este modelo foi implementado por Bardina *et al* (1997), cuja performance no acoplamento do termo pressão-velocidade apresenta as seguintes características:

a) uma combinação do **Modelo k-ω** (com suas características para descrever o comportamento do escoamento na camada limite) com o **Modelo k-ε** (com suas características para descrever o comportamento do escoamento fora da camada limite); e

b) introdução de uma limitação na tensão cisalhante da equação de quantidade de movimento (ver equação 3.2) nas regiões onde ocorre pressão adversa.

Desta forma, o modelo SST também é capaz de rastrear o comportamento do escoamento envolvendo tanto as grandes quanto as pequenas escalas de turbulência num escoamento.

Para escoamentos com superficies livres, o modelo SST é idêntico ao Modelo k-ε.

Segundo Chung (2002), a idéia básica deste modelo em relação à turbulência associada com a vorticidade **ω** de **Von Karman** pode ser representada pela equação:

$$\omega = c.\frac{k^2}{l} \tag{3.11}$$

Onde **k** é definido pela equação 3.7; **l** é o **Comprimento de Mistura de Prandtl** ao longo da coordenada **y**, dado por **l = κ . y**, onde **κ** éa **Constante de Von Karman**, cujo valor experimental é **κ** = 0,41; e **c** é uma constante de proporcionalidade.

Neste modelo, a viscosidade no escoamento turbulento, μ_t, é representada pela equação:

$$\mu_t = \rho.\frac{k}{\omega} \tag{3.12}$$

Desta forma, substituindo as equações 3.11 e 3.12 nas equações 3.8 e 3.9, obtem-se as duas equações **k** e **ω** do modelo **SST k-ω**:

$$\frac{\partial\ (\rho.k)}{\partial\ t} + (\rho.k)\frac{\partial V_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial\ x_i}\left[\mu_k.\frac{\partial k}{\partial x_i}\right] + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial \tau_i}{\partial x_j}.V_j\right) - \beta^*.\rho.\ k.\omega \tag{3.13}$$

$$\frac{\partial(\rho.\omega)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho.\omega.V_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\mu_\varepsilon.\frac{\partial \omega}{\partial x_i}\right]+\alpha.\frac{\omega}{k}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial \tau_i}{\partial x_j}.V_j\right)-\beta.\rho.\omega^2 \tag{3.14}$$

Os valores das constantes utilizadas são mostrados na Tabela 3.2.

Tabela 3. 2 Valores típicos das constantes do modelo de turbulência SST k-ω

α	β	β*	σ_k	σ_ε
$C_{\varepsilon 1}-1$	$C_{\varepsilon 2}-1$	C_μ		
0,556	0,075	0,09	0,50	0,50

Apesar de combinar características positivas dos modelos de turbulência **k-ω** e **k-ε**, o modelo **SST k-ω** apresenta ainda uma falha com relação à sua capacidade para calcular a quantidade de fluxo nas regiões com inversão do escoamento ou no limite da camada limite, segundo Bardina *et al* (1997). Desta forma, os valores de fluxo obtidos em quaisquer geometrias possuem a tendência de serem sobre dimensionados, Chung (2002). Esta característica negativa, por sinal, advém do modelo **k-ε** .

Para reduzir o efeito da tensão cisalhante **u.v** sobre o gradiente adverso de pressão no escoamento, conforme a equação de conservação da quantidade de movimento 3.2, Bardina *et al* (1997) apresenta a seguinte proposta para calcular a viscosidade presente no escoamento turbulento:

$$\nu_t=\frac{a_1.k}{\max(a_1.\omega.S.\Im)} \tag{3.15}$$

Onde $\nu_t=\mu_t/\rho$ é a viscosidade cinemática; $S=\partial V/\partial x$ é a tensão cisalhante do escoamento e invariável (por hipótese, neste modelo de turbulência); $a_1=c_\mu^{1/2}$; e $\Im$ é a **Função de Mistura**, que restringe um limite para a camada limite.

Esta função $\Im$ representa um parâmetro crítico para o sucesso do modelo de turbulência **SST k-ω**. Sua formulação é baseada na distância **y** da superfície mais próxima, onde os efeitos da camada limite são simulados utilizando as variáveis características do escoamento (pressão e velocidade), sendo dada pela seguinte equação.

$$\Im=\tanh(\psi) \tag{3.16}$$

Onde:

$$\psi=\max\left(\frac{2.\sqrt{k}}{a_1.\omega.y},\frac{500.\nu}{y^2.\omega}\right) \tag{3.17}$$

Maiores detalhes sobre a teoria e o equacionamento para este modelo são encontrados no trabalho de Bardina *et al* (1997).

3.3.2 Modelos de Combustão

Hamer e Roby (1997) apontam que o cálculo CFD apresenta uma característica peculiar quando é utilizado para a modelagem da combustão. Alguns modelos podem apresentar constantes que devem ser "adaptadas" a cada caso de modelo físico em estudo. Tais constantes podem alterar as taxas de reação esperadas na simulação da combustão.

Estas considerações permitem centralizar as equações de transporte (massa, quantidade de movimento e energia) em função de quatro espécies químicas chaves: H_2, CH_4, CO e NO e suas taxas de formação e de destruição através de um mecanismo "reduzido" de reações, Lyckama *et al* (2002). No presente trabalho, por exemplo, os principais componentes dos produtos da combustão podem ser CO_2, H_2O, N_2, CO, OH^{-1}, H^{-1}, O^{-2}, H_2, e NO, utilizando como combustíveis de referência, ou o metano, ou o gás natural.

Segundo Kuo (1986), uma equação de estado pode ser acrescentada ao processo de cálculo para acompanhar o comportamento de pré-misturas, como visto no item 3.2.

Dentre os parâmetros auxiliares, que podem ser utilizados pelos modelos de combustão, destaca-se o **Número de Damkholer**, que consiste em um parâmetro adimensional que caracteriza o tempo de reação químico de uma chama em função do tempo do escoamento turbulento, podendo ser dado pela equação:

$$\mathrm{Da} = \frac{t_{\mathrm{FLOW}}}{t_{\mathrm{CHEM}}} = \frac{d}{I_L} \tag{3.18}$$

Onde $\mathbf{t_{FLOW}}$ é o tempo de residência do escoamento; e $\mathbf{t_{CHEM}}$ é o tempo de residência na chama ou tempo de residência da reação; **d** é uma dimensão característica da turbulência (diâmetro do vórtice, por exemplo); e $\mathbf{I_L}$ é a espessura da chama.

Quando o número de Damkholer é alto (Da > 1) significa que a mistura entre combustível e oxidante se realiza lentamente, porém a reação química pode ser rápida, gerando chamas com velocidade de propagação relativamente mais alta do que a velocidade do escoamento turbulento da mistura reativa. Este comportamento também pode ser utilizado para caracterizar chmas, cuja origem seja por detonação ou explosão, porque têm curto tempo de residência da chama, como no caso dos motores de combustão interna dos tipos Otto ou Diesel.

Por outro lado, quando o número de Damkholer é baixo (Da < 1) significa que a mistura entre combustível e oxidante se realiza rapidamente, porém a reação química pode ser lenta, gerando chamas com velocidade de propagação relativamente mais baixa e comparável à velocidade do escoamento turbulento da mistura reaitva. Este comportamento pode ser utilizado para caracterizar as chmas, cuja origem seja por deflagação, por que têm prolongado tempo de residência da chama, como no caso das câmaras de combustão de turbinas a gás ou processos de combustão diretamente na atmosfera.

Outro parâmetro igualmente importante para o estudo dos modelos de combustão é o **Número de Lewis**, que pode ser usado para a caracterização de chamas não pré-misturadas ou difusivas e dado pela equação:

$$Le = \frac{k}{\rho.Cp.\wp} = \frac{\alpha}{\wp} = \frac{\text{Taxa de Transporte de Energia por Difusão}}{\text{Taxa de Transporte de Massa das especies por Difusão}} \qquad (3.19)$$

Onde **Cp** é o calor específico à pressão constante; $\wp$ é o coeficiente de difusão de massa de Fick; e **k** é o coeficiente de condutividade térmica; e ρ é a massa específica.

Em muitos processos de combustão, todas as espécies são consideradas possuirem as mesmas taxas de transporte de energia e massa por difusão, ou seja, **Le** unitário.

Quaisquer que sejam os modelos de combustão empregados pelo CFD, deve-se também considerados os modelos de reação em função da composição química dos combustíveis e do número de reações químicas. Neste contexto, o CFD utilizado pelo programa CFX v. 5.7@ possui uma biblioteca interna de reações, classificadas em três categorias:

a) Reações WDn: correspondem à aplicação do *Mecanismo Reduzido de Reações* desenvolvido por Westbrook e Dryer (1981). Por este mecanismo, as **n** reações de multi-etapas são aproximadas por um conjunto de **n** reações de simples etapa, onde o nitrogênio molecular $\mathbf{N_2}$ é tratado como um elemento passivo, ou seja, a fração mássica do mesmo pode ser calculado em função das frações mássicas de todos os outros componentes dos produtos da combustão;

b) Reações WGS: correspondem à aplicação do Mecanismo conhecido como *Water Gas Shif*. Por este mecanismo, a energia do CO é convertida em energia de ligação do H_2 e CO_2 através da reação de simples etapa $CO + H_2O \leftrightarrow H_2 + CO_2$. Também são levados em consideração os efeitos da energia cinética do escoamento turbulento na modelagem da combustão, tal como no mecasnimo de reação **WD**; e

c) Reações NO PDF: correspondem às reações de combustão, onde há formação do NO e pode ser afetado pela flutuação da temperatura ao longo da chama. Como um processo

estocástico, porque pode ser afetado pelo escoamento turbulento na chama, utiliza o mecanismo PDF ("Probability Density Function") para simular as flutiações do NO ao longo do processo de combustão.

Desta forma, apresentam-se a seguir os modelos de combustão que podem ser usados para caracterizar a chama produzida em câmaras de combustão para micro turbinas a gás e turbinas a gás.

- **EDM**

Este modelo foi desenvolvido para ser usado em uma ampla faixa de escoamentos turbulentos, com ou sem pré-mistura e onde os efeitos viscosos nos escoamentos podem ser considerados.

Por causa de sua simplicidade e sua robusta performance, este modelo tem sido amplamente aplicado no estudo do comportamento das chamas em câmaras de combustão industriais.

A combustão simulada usando o modelo EDM apresenta um mecanismo global de reação simples, o qual pode ser executado em duas fases:

a) fase 1: contempla uma reação de combustão com 1 passo; e
b) fase 2 : contempla uma reação de combustão com 2 passos.

A primeira fase é caracterizada pela seguinte reação:

$$C_XH_Y + a\,(O_2 + 3{,}76\,N_2) \rightarrow X\,CO_2 + (Y/2)\,H_2O + 3{,}76\,a\,N_2$$

Esta reação apresenta o uso de ar estequiométrico, ou seja, não apresenta nos produtos espécies incombustas, resíduos.

A segunda fase é caracterizada pelas seguintes reações:

$$C_XH_Y + a\,(O_2 + 3{,}76\,N_2) \rightarrow X\,CO + (Y/2)\,H_2O + 3{,}76\,a\,N_2 + \tfrac{1}{2}\,O_2$$

$$CO + \tfrac{1}{2}\,O_2 \rightarrow CO_2$$

De acordo com Lefebvre (1983), a taxa de reação pode ser afetada pelo escoamento turbulento, sendo estimada pela seguinte proporção de Komogorov:

$$\text{Taxa} \propto \frac{\varepsilon}{k} \tag{3.20}$$

Esta taxa é largamente aplicada nas simulações em equipamentos industriais, onde a taxa de reação é geralmente muito rápida, se comparadas à taxa da mistura dos reagentes, dependendo se o escoamento é turbulento ou não.

Existem basicamente duas formas de obter esta taxa de reação, valendo uma regra muito simples: a taxa de reação deve ser determinada a partir do menor valor encontrado entre as seguintes taxas:

- **Taxa dos Reagentes**

$$R_K = A \,.\, \frac{\varepsilon}{k} \,.\, \min\left(\frac{[I]}{\nu^{*}_{KI}} \right) \tag{3.21}$$

Onde **[I]** é a concentração molar de cada espécie entre os reagentes; e **A** é uma constante de proporcionalidade, que depende das propriedades físicas dos reagentes e se ocorre ou não pré-mistura.

- **Taxa dos Produtos**

$$R_K = A \,.\, B \,.\, \frac{\varepsilon}{k} \,.\, \left(\frac{\sum_P [I] \,.\, W_I}{\sum_P \nu^{**}_{KI} \,.\, W_I} \right) \tag{3.22}$$

Onde **P** rastreia todos os produtos gerados na reação **k**; **A** é um constante que depende das propriedades físicas dos produtos e da natureza da reação química em cadeia com ou sem ramificações, formadas pelos radicais livres; $\mathbf{W_I}$ é o peso molecular de cada componente do produto; e **B** é um parâmetro numérico que indica se a reação é de simples ou múltipla etapa. Se **B** é negativo, a formação dos produtos para determinada reação **k** não é realizada.

Contudo, o equacionamento para este modelo de combustão necessita ser visto separadamente, devido à sua complexibilidade. No anexo E, apresenta-se a teoria e o equacionamento utilizado para a dedução deste modelo.

- **FM**

Este modelo é baseado no conceito da chama não pré-misturada ou difusiva, onde as flutuações da turbulência são pequenas, dependendo do Número de Reynolds local, Peters (2000).

Este modelo permite obter informações das espécies químicas simples ou dos radicais livres, tais como CO e OH, função das altas taxas de dissipação de calor. Esta é uma característica vantajosa em relação aos modelos anteriores, porque evita os problemas relacionados à altas escalas de turbulência, onde a solução numérica exigiria um custo computacional oneroso, ou seja, altas escalas de tempo e memória requeridas para o cálculo.

O principal fator limitante deste modelo resume-se a simular casos onde o numero de Lewis seja desprezível ou as reações químicas sejam muito rápidas.

O acoplamento da cinética química e do escoamento turbulento para descrever a chama do tipo não pré-misturada ou difusiva pelo **FM** pode ser efetuado por um modelo estatístico, que permite descrever as flutuações escalares no campo do escoamento turbulento, quando a taxa de reação média não pode ser expressa em termos de concentrações médias.

Este modelo estatístico que pode auxiliar o cálculo realizado pelo modelo **FM** é conhecido como **Função Probabilidade de Densidade – PDF**, Chung (2002), cuja principal vantagem reside no fato da não necessidade da modelagem da não linearidade do termo fonte na Equação das Espécies (ver equação 3.1), como nos demais modelos de combustão. Em contrapartida, o termo representado pela variação da pressão estática e o termo representado pelo deslocamento difusivo na Equação de Conservação da Quantidade de Movimento são modelados.

Define-se **Função Probabilidade de Densidade** toda função probabilidade **P** que forneça de um valor **($\varphi < \Phi$)** de uma distribuição **$f(\Phi)$** de um escalar **φ** na forma:

$$P(\Phi) = \frac{d\,F_{\phi}(\Phi)}{d\,\Phi} \tag{3.23}$$

Onde **$P(\Phi)\ d(\Phi)$** é a probabilidade do escalar ϕ se encontrar no intervalo **(Φ, Φ + d Φ)**, tal que a seguinte identidade seja satisfeita:

$$\int_a^b P(\Phi)\, d\Phi = 1 \tag{3.24}$$

Onde **Φ** pode representar também o espaço amostral do escalar ϕ.

Por outro lado, segundo Chung (2002), pode-se definir uma função auxiliar **$g(\Phi)$** que represente esta distribuição estocástica, tal que a seguinte identidade seja satisfeita:

$$\int_a^b g(\Phi)\,.\,f(\Phi)\, d\Phi = \overline{g} \tag{3.25}$$

Onde **$g(\Phi)$** é uma função qualquer no mesmo intervalo **$a < \Phi < b$**.

Além disso, outra característica do modelo **FM** reside na não necessidade de modelar o termo fonte na equação de conservação de massa, considerando apenas a fração de mistura entre as espécies, o que permite onerar menos a capacidade do computador quanto ao tempo e a memória requerida para o cálculo. Para isso, o modelo **FM** pode usar outra ferramenta estatística conhecida como **Método de Monte Carlo**.

O **Método de Monte Carlo** é uma distribuição estocástica desenvolvida pelos cientistas americanos que projetaram a Bomba Atômica em 1942. É baseado na simulação de variáveis aleatórias, que permitam caracterizar problemas estatísticos, tais como: a flutuação da turbulência nos escoamentos, que podem afetar a distribuição de tempertura na chama.

Este método é considerado muito simples e flexível para ser aplicado em problemas de qualquer nível de complexidade. Entretanto, a maior inconveniência do método, é o número de simulações necessário para se reduzir o erro da estimativa da solução procurada, o que tende, na prática, a tornar o método muito lento.

Para resolver, por exemplo, a integral 3.25 pelo método de Monte Carlo, toma-se um número **n** de valores amostrais **δi**, gerados através de números aleatórios, com distribuição de probabilidades **f(Φ)**.

Com esses dados, a estimativa de **g** pode ser dada por

$$g = \frac{1}{n} . \sum_{i=1}^{n} g(\Phi_i) \tag{3.26}$$

Desta forma, a resolução da integral 3.26 foi reduzida a uma simples média aritmética, conforme a regra de Monte Carlo, que considera que para um grande número de amostras, a distribuição de probabilidade se aproxima de uma **Curva Normal de Gauss**, para o intervalo $P\left[\mu - 3 . \sigma < \delta < \mu + 3 . \sigma\right] \approx 0{,}997$, onde μ é a média aritmética, σ é o desvio padrão e **P** é a função probabilidade da amostra δ de estar neste intervalo.

Numa forma compacta, tem-se:

$$P\left[\left|\frac{1}{n} . \sum_{j=1}^{n} \delta_j - m\right| < \frac{3 . \nu}{\sqrt{n}}\right] \approx 0{,}997 \tag{3.27}$$

Onde **m** é o valor médio de uma serie de **n** medidas sobre as variáveis aleatórias δ_J escolhidas em um domínio **x**, com desvio padrão médio ν.

Além disso, o modelo **FM** permite analisar os efeitos decorrentes do "desequilíbrio" no **Problema de Burke-Schurmann para Chamas Difusivas**, ou seja, a influência de um escoamento secundário fora do campo do escoamento principal da zona de combustão, desde que sejam considerados os seguintes condicionantes: a) alta taxa de reação; b) o numero de Lewis para todas as espécies é constante e sempre igual a unidade; c) a combustão se realiza em camadas de elementos de chama, onde o escoamento pode ser laminar; e d) as espécies químicas que se misturam devem ser consideradas substâncias puras antes da mistura.

Por outro lado, considerando que pode existir regiões discretas na chama, onde momentaneamentea a pré-mistura entre oxidante e combustiveil seja suscetível, o modelo **FM** pode ser classificado ainda em duas categorias:

- **Considerações sobre os Modelos de Combustão pelo CFD**

Além dos modelos de combustão apresentados anteriormente, existem outros modelos que podem ser aplicados pelo CFD, cujas principais características são resumidas pela Tabela 3.3.

Tabela 3. 3 Aplicação dos modelos de combustão

Modelo de Cmbustão	Aplicação
"Eddy Dissipation Model" – EDM	1.Chamas em escoamentos turbulentos; 2. Quando a taxa de reação é mais rápida se comparada à escala de tempo da turbulência (alto Número de Damkohler); e 3. Quando a taxa de reação pode ser afetada pela pré-mistura de reagentes.
"Finite Rate Chemistry Model" – FRCM	1. Chamas em escoamentos laminares ou turbulentos; 2. Num escoamento turbulento, quando a taxa de reação é mais lenta do que a escala de tempo da turbulência (baixo Número de Dankholer); 3. Quando a taxa de reação pode ser afetada pela cinética química; 4. As informações sobre a cinética das taxas de reação das espécies são requeridas; e 5. Pode necessitar inicialização especial para a ignição da chama (temperatura depende das taxas de reação).
"Infinite Rate Chemistry Model"- IRCM	1. As informações sobre a cinética das taxas de reação das espécies não são requeridas; 2. Quando a taxa de reação não é necessariamente afetada pela cinética química; 3. Não necessita inicialização especial para a ignição da chama (temperatura independe das taxas de reação); e 4. Chamas podem ocorrer em escoamentos laminares ou turbulentos.
Combined EDM / FRCM	1. Chamas em escoamentos turbulentos; 2. Ampla faixa de número de Dankohler; 3. As informações sobre a cinética das taxas de reação das espécies são requeridas; e 4. Pode necessitar inicialização especial para a ignição da chama (temperatura depende das taxas de reação).
"Flamelet Model" - FM	1. Quando a taxa de reação é mais rápida se comparada à escala de tempo da turbulência (alto Número de Damkohler); 2. Chamas em escoamentos turbulentos; 3. Chamas não pré-misturadas; 4. O combustível e o oxidante são bem definidos até a zona de combustão; e 5. Necessita de uma biblioteca interna sobre os diferentes passos das reações químicas das espécies na mistura.

- **Especificação do Tempo Químico das Reações**

Em complementação as informações fornecidas pelo capitulo 2, Warnatz *et al.* (2006) comenta que a chama pré-misturada possui a característica de ser fácil controle com relação à mistura ignitável, pois a mistura de diferentes combustíveis pode ser feito de maneiras quaisquer, pois o oxidante pode atuar em cada componente do combustível separadamente.

Por outro lado, na chama não pré-misturada ou difusiva é mais difícil o controle da mistura ignitável, porque o oxidante reage com a mistura de combustíveis como se fosse um

combustível apenas. Neste caso, deve-se definir todas as propriedades físicas do combustível equivalente em função das propriedades físicas dos combustíveis misturados, conforme a Teoria Cinética dos Gases.

Devido às estas particularidades, a modelagem da combustão no CFD para chamas do tipo pré-misturadas, por exemplo, pode ser representada pela reunião de modelos de reação quaisquer, no caso particular dos modelos de combustão EDM e FRCM, separadamente.

Segundo Chung (2002), o uso dos modelos EDM ou FM encontra aplicação direta na modelagem da combustão de combustíveis com altas taxas de reação, como é o caso de combustíveis gasosos, como por exemplo, o gás natural.

No caso da modelagem da combustão de combustíveis, que apresentam baixas taxas de reação, como é o caso de alguns tipos de biomassa, os modelos EDM e FRCM podem utilizados juntos, Chung (2002).

Por outro lado, a simulação da combustão para chamas não pré-misturadas necessita de uma ferramenta adicional que permita criar o combustível equivalente de uma mistura de combustíveis. Esta ferramenta é, por exemplo, o CFX RIF, um pacote extra do programa CFX v.5.7® com a finalidade específica de criar modelos de combustíveis equivalentes para o modelo de combustão FM.

Conseqüentemente, a seleção do modelo de combustão pode depender do tipo de combustível testado, além de ser função do tipo de chama, da natureza do escoamento e da geometria da câmara de combustão.

Este conjunto de características afeta diretamente a definição do tempo químico da reação, o qual pode ser definido no item DOMAIN do software ANSYS CFX (ver anexo C), após a especificação do modelo de combustão.

O tempo químico pode ser definido segundo a escala de **Tempo de Kolmogorov**, dada por:

$$\tau_{chem} = \left(\frac{\upsilon}{\varepsilon} \right)^{1/2} \tag{3.28}$$

Onde υ é a viscosidade cinemática, em [m^3 / s], e ε é a energia dissipada pela turbulência, em [J]..

A equação 3.28 denota que o tempo químico da reação depende da dinâmica do escoamento e da dissipação da energia em função da turbulência. É um valor referencial, que pode ser utilizado para indicar o instante final para que ocorra, ou o consumo, ou a produção de espécies químicas numa reação.

A forma como estas espécies químicas são tratadas durante uma reação pode ser representado pelo conceito da Taxa de reação, que pode ser definida de forma simplificada pela seguinte equação, Warnatz *et al.* (2006):

$$\frac{\partial[\mathrm{A}]}{\partial \mathrm{t}} = -\mathrm{k}_{\mathrm{exp}}.[\mathrm{A}]^{\alpha} \tag{3.29}$$

Onde **[A]** é a concentração molar ou mássica da espécie **A**, por exemplo, o combustível; **t** é o tempo necessário para o consumo ou a produção de espécies em uma reação; $\mathbf{k_{exp}}$ é o coeficiente experimental (dado na forma $\mathbf{k.[B]^b.[C]^c.[D]^d....}$), função da taxa de reação **k** e das concentrações das espécies [B], [C], [D] e outras, cada uma com seu respectivo grau de reação **b, c, d**, e demais; e **α** é o grau da reação.

Nota-se da equação 3.29 que os combustíveis com alto coeficiente de taxa de reação podem ser mais bem simulados utilizando-se modelos de combustão, onde o tempo químico é pequeno, dependendo do grau de reação.

No caso de combustíveis gasosos ou líquidos com alto poder calorífico, tal como o gás metano, ou combustíveis ricos em metano em sua composição, tal como o gás natural, o tempo químico pode variar entre 0.00001 [s] a 0.010 [s], calculado pela escala de tempo de Kolmogorov, conforme Rutland e Rao (2003).

Wiiliams (1985), Peters (2000) e Warnatz *et al.* (2006) observam que os menores tempos químicos são típicos para chamas do tipo não pré-misturada, enquanto os maiores tempos químicos são típicos para chamas pré-misturadas.

Em geral, a especificação do tempo químico para os modelos de combustão EDM e FRCM é interativo, porque cada caso merece um ajuste neste tempo químico. No caso particular do FRCM, por exemplo, o tempo químico é limitado ao tempo de mistura (k/ε), que poderá variar entre 0.005 [s] até 0.040 [s], segundo Teodora *et al.* (2002). Além disso, segundo Warnatz *et al.* (2006), o tempo químico também pode caracterizar a posição relativa do centro da chama. De fato, para combustíveis com menor tempo químico, mantidas constantes a velocidade do escoamento da mistura ignitável e a razão ar / combustível, o centro da chama pode se formar numa posição mais próxima dos injetores de combustível.

3.3.3 Modelos de Radiação

Segundo Lefebvre (1983), a radiação é uma das formas mais comuns de transferência de calor realizada entre um meio fluido quente e as paredes da região fechada que o contenha,

como no caso das câmaras de combustão ou fornos, desde que estas paredes ou o fluido estejam quentes.

Esta transferência de calor se realiza proporcionalmente a temperatura destes meios, conforme a **Lei de Radiação de Stefan-Boltzmann para o Corpo Negro**:

$$q = \sigma \,.\, \varepsilon \,.\, T^4 \ (W/m^2) \tag{3.30}$$

Onde σ é a constante de Stefan Bolztmann e igual a $3.6705119.\ 10^{-8}$ (W/m^2K^4); ε é a emissividade do meio; e **T** é a temperatura absoluta do meio ou superfície quente.

A emissividade é uma característica diretamente associada à geometria e se o meio permite ($\varepsilon = 1$) ou não ($\varepsilon = 0$) a passagem de radiação, bem como pode ser usada para avaliar o percentual de absorção **a** da radiação pelo meio, interagindo à nível molecular, e o percentual de reflexão **r.**

Desta forma, a proposta da modelagem da radiação térmica é obter o volume total de absorção e emissão de radiação térmica, seguindo o procedimento:

a) resolver a Equação de Transporte da Radiação Espectral (RTE);

b) obter o termo de geração interna de calor da equação de conservação de energia; e

c) estimar os fluxos de calor das paredes.

A **Equação de Transporte de Radiação Espectral** pode ser escrita na seguinte forma, Beer *et al*. (1971) e Chung (2002):

$$\frac{d\, I_\nu\,(r,s)}{d\, s} = -\left(K_{a\nu} + K_{s\nu}\right).\, I_\nu\,(r,s) + K_a\,.I_b\,(\nu,T) + \\ + \frac{k_{s\nu}}{4.\pi}.\int_{4.\pi} dI_\nu\,(r,s').\,\Phi(s \bullet s')\, d\Omega + S \tag{3.31}$$

Onde ν é a freqüência; **r** é o vetor posição; **s** é o vetor direção; ***s´*** é o comprimento do caminho percorrido pela radiação; $\mathbf{K_{av}}$ é o coeficiente de absorção do meio; $\mathbf{K_{sv}}$ é o coeficiente de reflexão do meio; $\mathbf{I_b}$ é a intensidade da emissão do corpo negro; $\mathbf{I_n}$ a intensidade da radiação espectral que depende da posição **r** e da direção **s**; **T** é a temperatura absoluta; Ω é o ângulo do sólido; Φ é a função fase da reflexão devido ao sólido imerso no meio; e **S** o termo fonte de radiação.

De modo geral, o primeiro membro da esquerda significa a taxa de transferência de radiação no meio, função da posição **r** e da direção **s**. O primeiro membro da direita indica a radiação absorvida e refletida no meio. O segundo membro da direita indica a radiação do

corpo de fundo, que depende de uma superfície sólida. O terceiro membro da direita indica a radiação oriunda da reflexão da superfície de um sólido imerso no meio, e o último membro da direita é o temo fonte de geração interna de calor pela combustão.

Para resolver esta equação, as condições de contorno que podem ser consideradas para o cálculo CFD são, segundo Chung (2002):

- **Superfícies Opacas Reflexivas com Emissão de Radiação "difusa"**

$$I_\nu\ (r_w, s) = \varepsilon_\nu\ (r_w)\ .\ I_b\ (\nu, T) + \frac{\rho_w\ (r_w)}{\pi}.\ \int_{n\ .s'} I\nu\ (r_w, s')\left|n \bullet s'\right|\ .d\Omega \tag{3.32}$$

- **Superfícies Reflexivas com Emissão de Radiação "difusa" e Reflexão do Meio**

$$I_\nu\ (r_w, s) = \varepsilon_\nu\ (r_w)\ .\ I_b\ (\nu, T) + \frac{\rho_w\ (r_w)}{\pi}.\ \int_{n\ .s'} I\nu\ (r_w, s')\left|n \bullet s'\right|\ .d\Omega +$$

$$+ \rho_\nu (r_w)\ .I_\nu (r_w, s_S) \tag{3.33}$$

- **Superfícies Semi Transparentes**

Este caso é resolvido somente pelo **Modelo de Monte de Carlo** para a Radiação.

Como visto no capítulo 2, a transferÊncia de calor por radiação é um fenômeno complexo, devido à quantidade de variáveis envolvidas. Desta forma, existem atualmente 5 diferentes modelos de radiação normalmente utilizados no CFD, os quais colocados em ordem crescente de transparência do meio, são os seguintes: **Modelo de Rosseland**; **Modelo P1**; **Modelo de Transferência Discreta**; **Modelo de Monte Carlo**; e **Modelo Espectral**.

A seguir, apresentam-se os modelos de radiação que podem ser aplicados à chama produzida em câmaras de combustão para micro turbinas a gás e turbinas a gás, observado as características de emissividade, absorção, reflexão do meio constituído pelos produtos da combustão.

- **Modelo P1**

A **Aproximação Diferencial** ou **P1** é também uma simplificação da equação 3.33, assumindo que a intensidade da radiação é independente da direção e isotrópica para uma dada posição no espaço.

Neste modelo, o fluxo de calor radiante no limite da difusão para o meio que o emite, o absorve e o reflete pode ser calculado pela expressão:

$$q_{rv} = -\frac{1}{3\,.\,(K_{av} - K_{sv}) - A\,.\,K_{sv}}.\nabla\, G_v \tag{3.34}$$

Na equação de transporte de radiação espectral 3.81, este termo permite obter a seguinte identidade:

$$-\nabla \bullet \left[\frac{1}{3\,.\,(K_{av} - K_{sv}) - A.K_{sv}}\,.\,\nabla\, G_v\right] = K_{av}\,.\,(E_{bv} - G_v) \tag{3.35}$$

Onde **A** é **Coeficiente Linear de Anisotropia**.

Desta forma, assumindo que a radiação emitida pelas paredes do domínio que contenham a reação de combustão seja independente da direção, a condição de contorno nesta região pode ser calculada pela expressão:

$$n \cdot q_{rv} = -\frac{1}{3\,.\,(K_{av} - K_{sv}) - A.K_{sv}}\,.\frac{\partial\, G_v}{\partial\, n^+} = \frac{\varepsilon_v}{2\,.\,(2-\varepsilon_v)}.[E_{bv} - G_v]_w \tag{3.36}$$

Onde **n** é o vetor unitário normal à superfície da parede; $\mathbf{n}^+$ é a distância na mesma direção de **n**; e **w** é o valor de $\mathbf{n}^+$ na parede.

Mais detalhes sobre a forma completa da equação de energia e o equacionamento do modelo P1 são dados por Raithby (1991).

- **Modelo de Transferência Discreta de Calor**

Este modelo permite simplificar a equação 3.33 assumindo que a transferência de radiação se realize num meio isotrópico, reescrevendo-a para a seguinte expressão:

$$\frac{d\, I_v(r,s)}{d\, s} = -(K_{av} + K_{sv})\,.\,I_v(r,s) + K_a\,.\,I_b(v,T) + \frac{Ksv}{4.\pi}.\int_{4.\pi} I_v(r,s')\,.\,d\Omega + S \tag{3.37}$$

Assumindo que o meio seja homogêneo, tem-se:

$$I_v \approx I_v\,(r+dr) \qquad\qquad q_v^R\,(r) \propto q_v^R\,(r+dr) \tag{3.38}$$

Desta forma, o modelo permite calcular a radiação $\mathbf{I_v}$ ao longo de raios saindo das paredes pela expressão:

$$I_v\,(r,s) = I_{v0}\,.\exp\left[-(K_{av} + K_{sv})\,.s\right] + I_{bv}\,.\left[1 - \exp\left(-K_a\,.\,s\right)\right] + K_{sv}\,.\,\bar{I}_v \tag{3.39}$$

Onde $\mathbf{I_{v0}}$ é a intensidade da radiação saindo da parede; $\mathbf{I_\nu}$ é a intensidade média da radiação no meio; $\mathbf{I_{b\nu}}$ é a intensidade da radiação devida ao corpo negro; e **s** é a variável equivalente ao tempo, quando se aplica a **Transformada de Laplace** na equação 3.39.

Além disso, integrando a intensidade **Iν (r,s)** dada por 3.39 pela integral indicada em 3.37 sobre o ângulo **Ω** do sólido através de pontos discretos distribuídos sobre o corpo imerso no meio que irradia calor, pode-se calcular a Intensidade da radiação Incidente, **G**, e o fluxo de calor radiado, $\mathbf{q_r}$, assumindo que o meio seja homogêneo e, considerando através de cálculo interativo, os efeitos decorrentes das não linearidades do sistema devido à reflexão e à radiação, que são dependentes da temperatura.

Como o principal objetivo da modelagem da radiação térmica é obter o volume total de absorção e emissão de radiação, cálculos adicionais devem ser ainda considerados, como é visto adiante para os modelos Espectrais do tipo "Gray", "Multi-Gray", e Multibanda.

De maneira comparativa, enquanto para o modelo de radiação "Gray", o cálculo é realizado sobre um único campo de radiação, nos modelos "Multi-Gray" e Multi-Banda, a solução é computada para cada espectro da radiação, sendo depois integrada para obter as freqüências das radiações emitidas.

- **Modelo Espectral**

A intensidade do campo de radiação térmica é também função do espectro como mostrado na equação 3.82. Desta forma, procurando vincular o escoamento dos gases quentes oriundos da combustão com o espectro de radiação, foram desenvolvidos basicamente 3 modelos espectrais para o cálculo CFD, a saber: **Modelo "Gray"**; **Modelo "Multi-Banda"**; e **Modelo "Multi-Gray"**.

- **Modelo "Gray"**

Este modelo assume que a radiação é uniforme através do espectro, determinando que a intensidade da radiação é a mesma para todas as freqüências.

Conseqüentemente, o termo na equação 3.31 que depende da freqüência pode ser desprezado.

Esta consideração implica que somente a equação de transferência de calor deve ser resolvida, bem como as quantidades de radiação e seu respectivo espectro são os mesmos em todo o domínio.

Este modelo de espectro normalmente é usado em conjunto com os modelos de radiação **DTM** ("DiscreteTransfer Model") e **Monte Carlo** (modelo estatístico que considera

os efeitos da radiação passante num meio transparente, cuja intensidade é proporcional ao fluxo dos fótons no meio)..

- **Modelo "Multi-Banda"**

Para este modelo, a radiação é aproximadamente uniforme e seu espectro pode ser dividido em **N** faixas espectrais de finito comprimento de onda, onde a intensidade da radiação é uniformemente distribuída sem perda de precisão.

Estas faixas devem estender-se sobre a seção da radiação térmica do espectro da combustão em andamento.

Desta forma, o principal parâmetro é a freqüência de radiação, desde que seja dependente do índice de refração do material.

Este modelo de espectro normalmente é usado em conjunto com os modelos de radiação **P1** e **DTM** ("DiscreteTransfer Model").

- **Modelo "Multi-Gray"**

Neste modelo, pode-se admitir que o meio pode absorver parte da radiação em função da emissividade, da temperatura e do produto da pressão e do comprimento do caminho percorrido pela radiação (**p . L**).

No contexto dos sistemas de combustão típicos, os agentes emissores de radiação são o Dióxido de Carbono e o Vapor de Água. Por outro lado, apesar dos hidrocarbonetos, CO e SO_2 serem também emissores, sua contribuição é pequena.

A partir dos trabalhos de Hottel e Sarofin (1967), que analisam as emissões de radiação térmica do CO_2 e H_2O, verifica-se que a emissividade varia proporcionalmente com relação ao produto (**p.L**) e, também, com relação à temperatura do gás.

Este modelo de espectro pode ser utilizado juntamente com os modelos de radiação P1 e Rosseland.

- **Modelo de Dispersão da Radiação ("Scattering Model")**

Este modelo é utilizado para caracterizar a dispersão da radiação num meio. Normalmente, como as propriedades físicas do fluido de trabalho são consideradas serem as mesmas em todo o domínio físico, o modelo de dispersão da radiação permite admitir que o meio seja ou não Isotrópico para a radiação.

Este modelo de dispersão se aplica tanto para meios semi-transparentes, quanto transparentes.

A dispersão é relativa à quantidade de raios emitidos por elementos paramétricos de formado esférico que podem ser posicionados nos centros dos elementos da malha. Normalmente, o número de raios de emissão da radiação a partir destes elementos paramétricos pode variar de 8 a 128 raios, conforme limitação do algoritmo do CFD. Quanto maior a quantidade de raios utilizada pelo "Scattering Model", mais oneroso fica o cálculo.

3.3.4 Modelos de Variação da Energia no Sistema

Todo fluxo de massa e/ou calor na superfície de controle de um sistema pode afetar em regime permanente ou não, a energia total no seu volume de controle, a qual pode ser caracterizada pela soma das variações na energia interna e/ou entalpia, energia cinética e energia potencial, Lefebvre (1983).

Para determinar esta variação da energia, o CFD disponibiliza três modelos, a saber: **Modelo Isotérmico**, **Modelo de Energia Térmica**, e **Modelo de Energia Total**.

O **Modelo Isotérmico** para o fluido considera que a variação da energia pode decorrer somente da variação da energia cinética do fluido de trabalho, à temperatura constante.

O **Modelo de Energia Térmica** para o fluido admite que a variação da energia depende mais da variação da entalpia e/ou energia interna, função da variação da temperatura.

O **Modelo de Energia Total** para o fluido admite que a variação da energia ocorre devido à soma dos efeitos da variação da energia cinética do fluido e da variação da entalpia e/ou energia interna. Geralmente, este modelo é adotado quando o Número de Mach do escoamento é maior do que 0.2 e a mistura não é multifásica.

Este último modelo é apropriado para escoamentos afetados ou não pela compressibilidade.

3.3.5 Condições de Convergência

Como visto no item 3.3.4, o cálculo CFD é um processo iterativo de cálculo que resolve as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia com a finalidade de determinar o comportamento de um fenômeno físico em estudo sobre discretos elementos de volume.

A cada iteração, o parâmetro usado para quantificar a convergência dos cálculos é o **erro**. O **Erro** é calculado a partir do **Erro Médio Quadrático**, que no estudo do comportamento da chama para um modelo de câmara de combustão, é obtido:

a) Para cada uma das projeções das velocidades do escoamento no domínio tridimensional;

b) Para cada vazão mássica;

c) Para temperatura do meio;

d) Para variação da energia dissipada pela turbulência e na própria turbulência; e

e) Para emissão de NOx gerado, dependendo do combustível usado na simulação.

Desta forma, tem-se dois parâmetros para o controle da qualidade dos cálculos: o **Erro-Alvo Global**; e o **Número de Iterações**. No caso de analise de transiente, também devem ser levados em consideração: o tempo total; o incremento de tempo; e o método de incremento de tempo. Enquanto o primeiro fixa um valor de referência a ser usado para os cálculos de todos os erros citados acima, o segundo parâmetro limita a quantidade de vezes que o cálculo é executado, bem como o custo computacional (tempo de processamento e memória requerida).

Desta forma, após expor no presente capítulo os principais conceitos relacionados à Dinâmica de Fluidos Computacional, no próximo capítulo apresenta-se um estudo de caso englobando os modelos de escoamento turbulento, de combustão e de transferência de calor adotados para o estudo termo aerodinâmico de um modelo de câmara de combustão do tipo anular pertencente a uma micro turbina a gás da Solar Turbines.

Capítulo 4

MODELAGEM DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO

No presente capítulo, realize-se a modelagem geométrica de uma câmara de combustão com a especificação dos modelos matemáticos para o escoamento, a combustão e a transferência de calor por radiação, bem como o estabelecimento das condições de convergência para os cálculos, conforme é requerido pela metodologia prática do cálculo CFD.

A modelagem é executada em duas etapas: a primeira contemplando o estudo aerodinâmico, testando diferentes modelos de escoamento turbulento; e a segunda parte engloba os estudos termo aerodinâmicos, testando diferentes modelos de combustão.

4.1 Descrição da Metodologia

O procedimento proposto por este trabalho, o qual refere-se à aplicação da Dinâmica de Fluido Computacional apresentada no capítulo 3, pode ser utilizada, tanto para melhoria de projetos existentes focando melhor desempenho, quanto para projetos de desenvolvimento de novos equipamentos otimizados, em particular, as câmaras de combustão para turbinas a gás.

Na primeira parte desta metodologia, os dados de entrada básicos necessários para a aplicação desta metodologia para ass câmaras de combustão, contemplam: a) geometria do modelo; b) condições de operação do modelo (vazão, pressão e temperatura do ar do compressor na entrada da câmaraa e do combustível nos bicos injetores); c) tipo, composição química e propriedades físicas do combustivel adotado; e d) seleção de modelos matemáticos para a simulação do escoamento, da combustão, da transferência de calor e emissões.

Dentre os dados de entrada indicados, as condições de operação da câmara de combustão são determinados com a aplicação de um pograma para simulação do ciclo térmico da turbina a gás, do qual é possível determinar as condições de entrada e saída de todos os componentes da máquina. Também, quanto ao combustível adotado, a estimativa da composição química dos produtos de sua combustão podem ser determinados coma aplicação de um segundo programa para a simulação da reação química da combustão, da qual é possível determinar as concentrações dos principais agentes poluidores, nem como uma temperatura de referência para a chama.

Com relação aos modelos matemáticos, é necessário recorrer a revisão bibliográfica de artigos e resultados experimentais, que são utilizados com a intenção de qualificar e/ou validar estes modelos.

No item 4.2, mostra-se a câmara de combustão adotada. No item 4.3 é apresentado o programa adotado para a simulação de ciclos térmicos e, no item 4.4, o programa adotado para a simulação da reação química da combustão. Do item 4.5.1 a 4.5,7 mostram-se a modelagem da geometria da câmara de combustão, a geração da malha e a definição das condições de cálculo (condições de contorno e modelos matemáticos).

Tendo estes dados à disposição, a segunda etapa da metodologia realiza o cálculo numérico com a aplicação dos modelos matemáticos selecionados na primeira etapa para a simulação do escoamento, da combustão, da transferêmncia de calor e emissões, respeitadas determinadas condições de convergência durante a realização destes cálculos.

A terceira etapa consiste em analisar os resultados do cálculo numérico, por onde é possível identificar o comportamento termo-aerodinâmico do escoamento e da chama e, principalmente, os efeitos da geometria da câmara sobre este comportamento através do levantamento das distribuições de temperatura, pressão e velocidade ao longo da câmara. Em adição, também pode-se ter o levantamento das distribuições de temperatura, pressão e emissões na exaustão da câmra de combustão, que são parâmetros importantes no projeto dos tores das turbinas a gás.

Nesta última etapa, como resultado das analises pode-se também sugerir potenciais modificações no projeto original de câmara de combustão existente ou em desenvolvimento (como no caso específico da mudança de combustível de trabalho e seus efeitos sobre a estabilidade e vida útil do equipamento, por eemplo). Esta etapa também pode ser denominada de Engenharia Reversa.

O item 4.5.8 mostra as cndições de convergênxia do cálculo, enquanto os itens 4.6 e 4.7 apresentam os trabalhos de validação adotados para a metodologia. No capítulo 5, apresenta-se a análise dos resultados obtidos.

A Figura 4.1 mostra um esquema básico que resume a metodologia empregada neste trabalho.

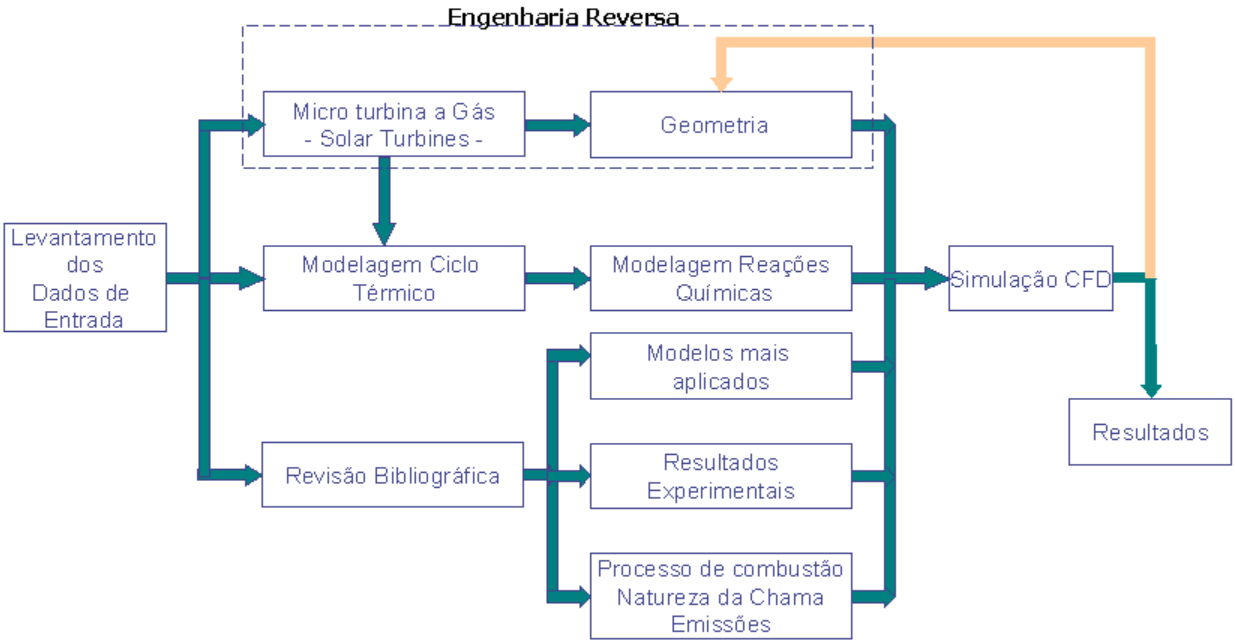


Figura 4. 1 Esquema básico da metodologia aplicada neste trabalho

4.2 Descrição do Modelo da Micro Turbina a Gás Testada

A geometria estudada consiste em uma micro turbina a gás com câmara de combustão do tipo anular, modelo T-62T–32 fabricada pela SOLAR, acoplada a um gerador elétrico de 60 Hz, modelo MUE 29 / E com potência máxima de 50 kW, conforme é apresentado pela Figura 4.2. Sua ignição é do tipo elétrica, modelo MIL–W–5088 da empresa Systens Wire.

Technical Manual Overhaul (1992) apresenta as características operacionais e de manutenção do modelo de micro turbina a gás modelo T-62T-32 'Titan' da fabricante Solar Turbines, a qual é usada nas simulações numéricas por este trabalho. Informações adicionais podem ser encontradas nos seguintes endereços na Internet:

- http://www.avonaero.com/solar32.htm
- http://www.users.zetnet.co.uk/gas/t62t32.htm

Sua câmara de combustão apresenta 6 injetores de combustível dispostos de um ângulo de 60° de um ao outro em relação ao eixo principal. Existem 86 orifícios primários e 46 orifícios secundários dispostos em uma posição radial em relação ao eixo principal.

Enquanto os orifícios primários são utilizados para a admissão do ar utilizado para misturar-se com o combustível e iniciar a combustão, os orifícios secundários são utilizados para diluir os gases quentes que acionam o rotor da turbina.

Um destes modelos de micro turbina a gás se encontra instalado nas dependências do Laboratório de Sistemas Térmicos da Universidade Federal de Itajubá, como mostra a Figura 4.3. A câmara de combustão desta micro turbina a gás é apresentada na Figura 4.4.

Mais detalhes sobre os componentes deste modelo de micro turbina a gás se encontram no Anexo A.

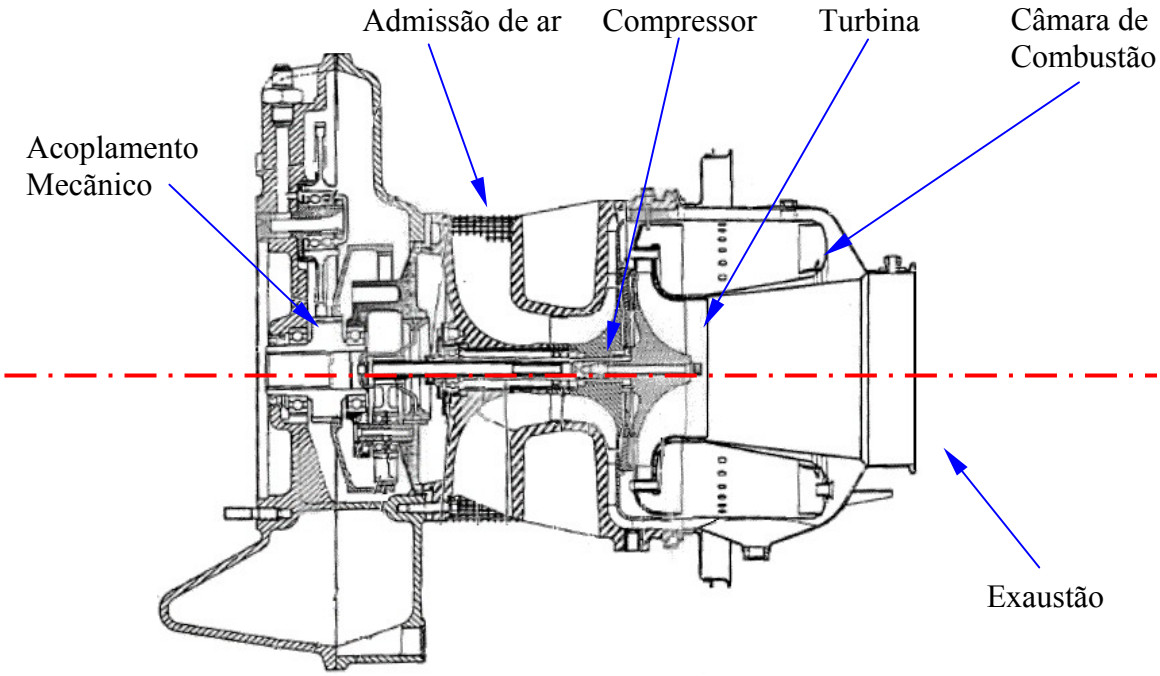


Figura 4. 2 Micro turbina a gás testada, modelo T-62T – 32 da SOLAR

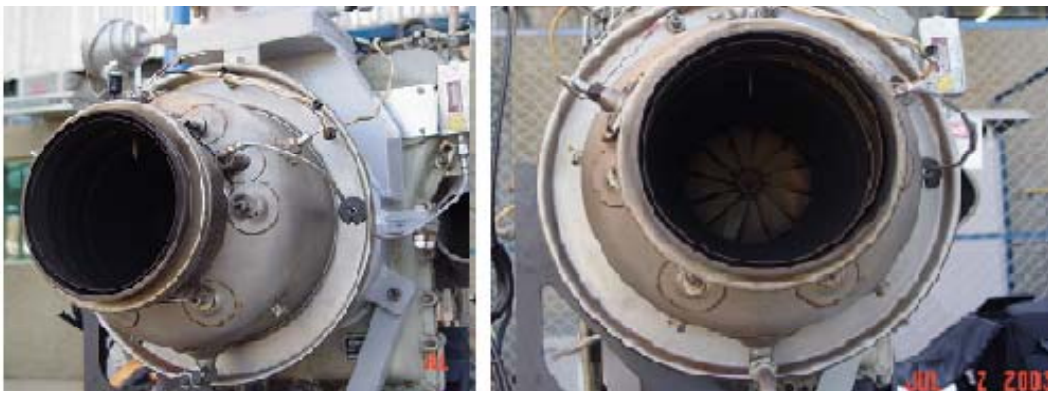


Figura 4. 3 Micro turbina a gás T-62T – 32 nas dependências do Laboratório de Sistemas Térmicos do NEST – UNIFEI

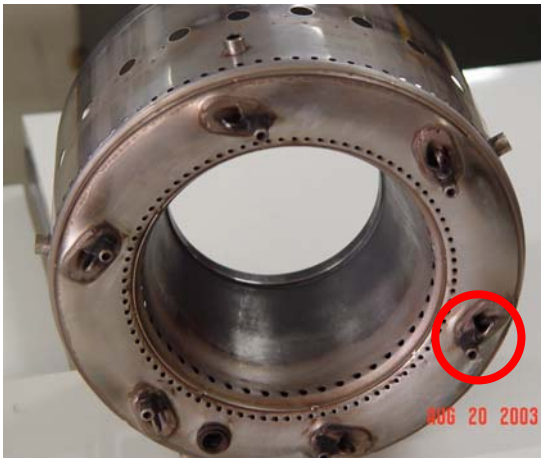


Figura 4. 4 Câmara de combustão desmontada, com destaque para um dos bicos injetores (circulo vermelho)

Esta micro turbina a gás foi projetada para operar, seja com diesel, seja com querosene, seguindo os dados técnicos da Tabela 4.1.

Tabela 4. 1 Dados técnicos do equipamento segundo o fabricante

Local	Grandeza	Unidade	Valor
Condições ambientes	Pressão ambiente	atm	1
	Temperatura ambiente	ºC	25
Compressor	Temperatura do ar na entrada	ºC	25
	Temperatura do ar na saída	ºC	199
	Vazão mássica do ar	kg/s	0,95
	Pressão do ar na saída	Pa	91630
	Potência nominal do compressor	KW	45
Injetor	Pressão da entrada do combustível	Pa	368140
	Temperatura do combustível	ºC	25
	Vazão nominal do combustível	kg/s	0,011
	Vazão máxima do combustível	kg/s	0,014
	Consumo de combustível	kg/ kWh	0,86
Turbina	Temperatura máxima na entrada da turbina	ºC	637,78
	Temperatura nominal na entrada da turbina	ºC	368,33
	Temperatura máxima do gás na exaustão	ºC	493
	Rotação nominal	rpm	61091
	Peso total da turbina	kgf	56

No injetor, o combustível é arrastado pelo ar devido à diminuição na pressão relativa do escoamento do ar na região do estrangulamento – **Efeito Venturi** -, como é mostrado no detalhe do injetor na Figura 4.5.

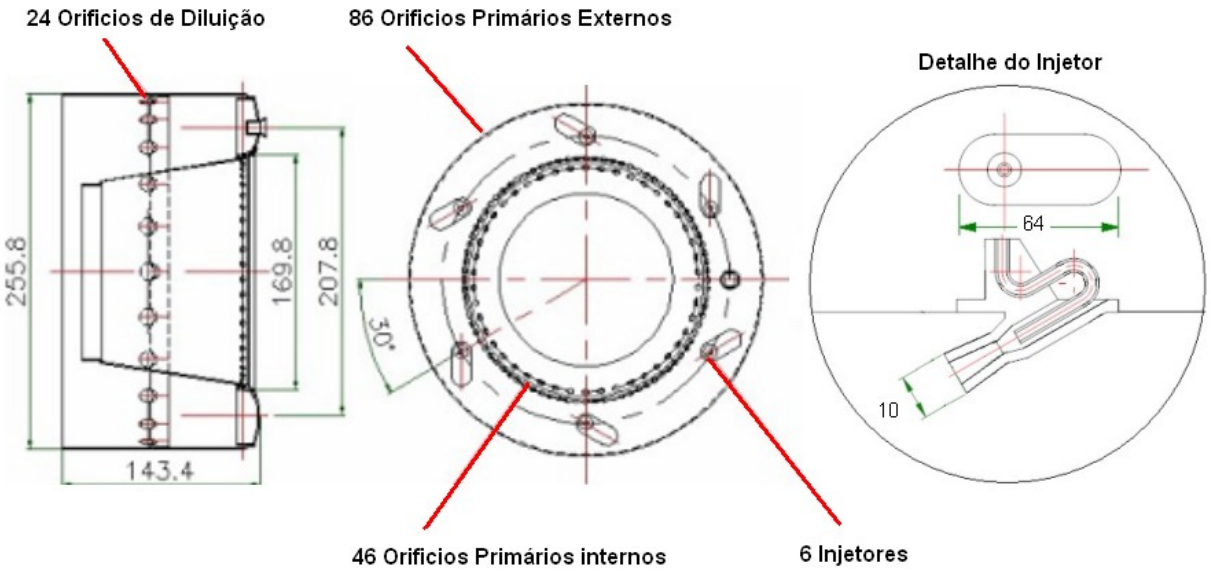


Figura 4. 5 Vista lateral da câmara de combustão. No detalhe à direita, o injetor de combustível com o estrangulamento

Mais detalhes sobre os componentes deste modelo de micro turbina a gás se encontram no Anexo A.

4.3 Cálculo Termodinâmico do Ciclo da Micro Turbina a Gás Testada

O combustível adotado para as simulações na câmara de combustão do tipo anular da Solar Turbines é o gás natural, que pode alterar significativamente as condições operacionais da câmara de combustão, inicialmente projetada para operar com diesel e/ou querosene. Desta forma, é necessário estimar como esta câmara de combustão se comportaria utilizando o gás natural.

Considerando a condição local da instalação do modelo, ou seja, cidade de Itajubá, Minas Gerais, cujas condições ambientes são: Altitude 840 m, Temperatura 22 [°C] e Pressão 687,3 [mmHg] (91,63 [kPa]), podem-se estimar o equilíbrio termodinâmico quanto à pressão, temperatura e vazão mássica para o ar e o gás natural em pontos estratégicos do ciclo termodinâmico da micro turbina testada (condições nas entradas e saídas dos componentes), usando o pacote comercial GateCycle ® da GE Electronics. Este software possui uma ampla biblioteca de ciclos de turbinas a gás e turbinas a vapor, que permite analisar e caracterizar o comportamento do ciclo térmico em condições tanto dentro quanto fora da condição de projeto para todos os componentes.

A Figura 4.6 apresenta a tela do GateCycle para a micro turbina a gás testada.

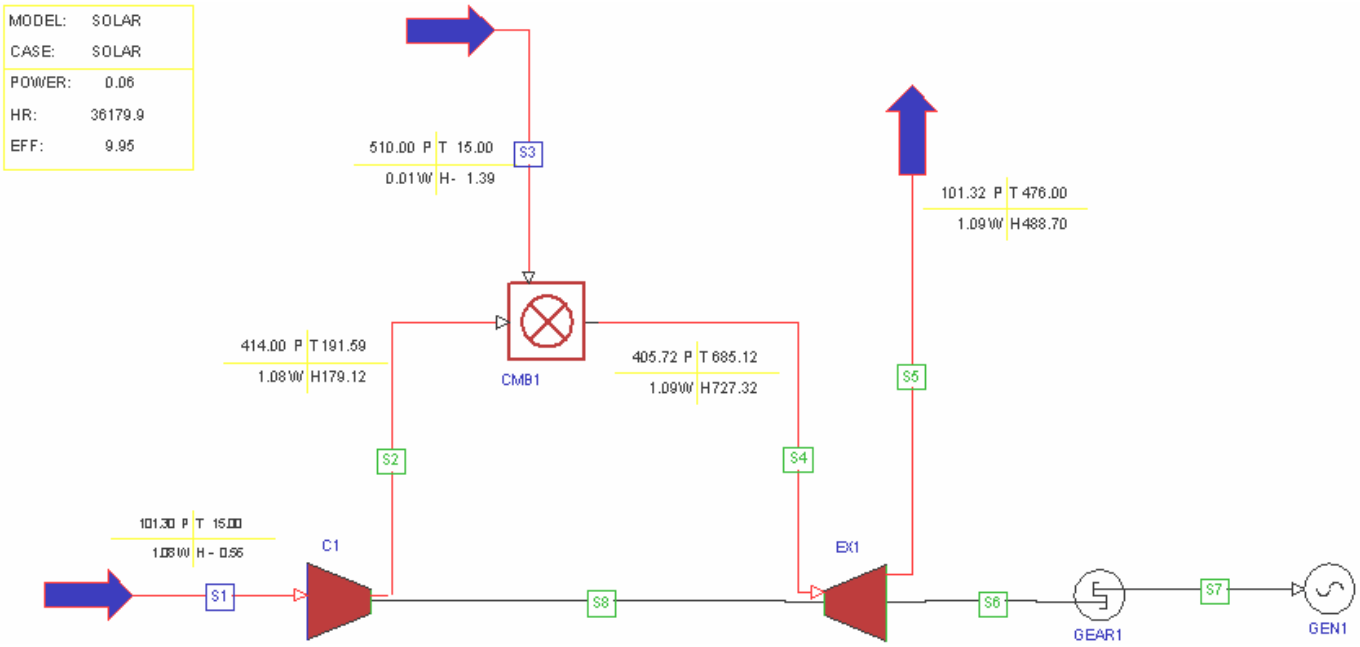


Figura 4. 6 Esquema elaborado pelo GateCycle para a micro turbina testada

Da Figura 4.6, a temperatura e a pressão são calculados para todos os pontos, baseando-se no equilíbrio termodinâmico. Outros parâmetros usados por este programa, tais como, perdas de carga térmica e perdas de pressão são obtidos por Borbely *et al*. (2001) e Lefebvre (1983).

A Tabela 4.2 apresenta os valores finais para a última iteração obtidos pelo GateCycle referentes aos pontos de controle **S1** ao **S5** da Figura 4.6.

Tabela 4. 2 Valores obtidos pelo GateCycle para a micro turbina testada

Potência da Turbina	Ponto	Temperatura (ºC)	Pressão (kPa)	Vazão (kg/s)	Entalpia (kJ/kg)
51,01 kW	S1	22,00	91,63	0,95609	6,54
	S2	199,80	368,14	0,95609	188,32
	S3	22,00	510,00	0,01144	14,29
	S4	685,12	360,78	0,96754	736,22
	S5	478,50	91,63	0,96754	497,52

Da Tabela 4.2, os valores calculados nos pontos de controle **S2**, **S3** e **S4** da Figura 4.6 podem ser usados para estabelecer as condições de contorno para a simulação do comportamento da câmara de combustão.

4.4 Cálculo Termo Químico da Mistura Combustível e Oxidante

Da literatura técnica, existem muitos softwares que permitem modelar o processo termo químico da combustão com a finalidade de determinar as concentrações dos reagentes e produtos da combustão, temperatura máxima, e, principalmente, a composição das emissões de NOx, CO e SO. O software utilizado neste trabalho denomina-se GASEQ v.79 ®.

O programa GASEQ ® é uma versão simplificada do **Método de Minimização da Energia Livre de Gibbs** (**Método Lewis - NASA**) e disponibilizada pela Internet (http://www.gaseq.co.uk). Este programa possui uma biblioteca formada por 127 espécies químicas. A modelagem da reação neste programa considera que a reação de combustão realiza-se em um meio limitado por paredes adiabáticas, conforme o equacionamento proposto por Svehla e McBride (1973).

O **Método Lewis NASA** foi implementado por Svehla e McBride (1973) no Lewis Research Institute na NASA e consiste de um programa interativo que permite realizar a análise termo química para algumas reações de combustão a partir do levantamento do equilíbrio termodinâmico e do equilíbrio de massas das espécies químicas em estudo, útil para uma ampla escala de aplicações cientificas e de engenharia para muitas variáveis independentes, bem como a estimativa das emissões para diferentes combinações de ar e combustível e em função da temperatura da mistura.

Seja, por exemplo, a combustão do gás natural aplicada ao GASEQ®. A Tabela 4.3 apresenta a composição química do gás natural processado e seu respectivo Poder Calorífico Inferior, segundo Abreu e Martinez (1999).

Tabela 4. 3 Composição química do gás natural processado, Abreu e Martinez (1999)

Espécies	Composição em volume (%)
	Gás Natural
N_2	1,2
CO_2	0,65
CH_4	88,56
C_2H_6	9,17
C_3H_8	0,42
Poder Calorífico inferior [kcal/hg]	11430

Da Tabela 4.3, nota-se que o gás natural é formado principalmente pelos gases metano e etano. Desta forma, pode-se extrair a partir dos resultados do GASEQ® v7.2 as condições apropriadas para configurar os gases metano e etano para representar o gás natural como o fluido de trabalho utilizado pelo CFD.

No Anexo C apresentam-se as telas do GASEQ® v7.2 com os resultados dos cálculos executados para o gás natural, considerando-se a temperatura da mistura ar e combustível igual a 295 [K] e a pressão ambiente (referência) de 1 [atm].

A Tabela 4.4 apresenta a composição química dos reagentes e produtos da combustão do gás natural simulado pelo GASEQ® v 7.2.

Tabela 4. 4 Composição dos reagentes e produtos da reação de combustão para o gás natural procesado, obtida pelo GASEQ® v7.2.

Local	Espécies	Composição	
		(Mol)	Massa (kg)
Reagentes	CH_4	0,08127	1,30380
	C_2H_6	0,02310	0,69461
	O_2	0,21	6,71975
	N_2	0,79	22,1326
Produtos	CO_2	0,08223	3,61902
	H_2O	0,20871	3,76001
	N_2	0,78986	22,1286
	O_2	0,00011	0,00338
	CO	0,04524	1,26713
	OH^-	0,00106	0,01802
	H^+	0,00081	0,00082
	O^{-2}	0,00003	0,00042
	H_2	0,02219	0,04474
	NO	0,00029	0,00865

Da Tabela 4.4, pode-se extrair informações sobre as concentrações das emissões de NOx e CO. Do programa GASEQ® v 7.2, pode-se obter também o valor da temperatura adiabática da chama, cujo valor é 2183 [K].

Uma outra informação importante que pode-ser obtida da Tabela 4.4 é sobre a fração mássica dos produtos da combustão, a qual é usada para a definição das condições iniciais do cálculo no item 4.4.3.

4.5 Modelagem da Câmara de Combustão

4.5.1 Modelo Geométrico

Segundo Rizk e Monglia (1991), e Gosselin *et al*. (2000), pode-se realizar o estudo do comportamento das câmaras de combustão coletando dados referentes a um setor longitudinal do modelo, função do número de injetores e garantido pela simetria geométrica.

Neste trabalho, o modelo geométrico testado equivale a 1/6 parte da câmara de combustão, pois existem 6 injetores. Esta simplificação pode ser executada considerando-se a simetria em relação ao eixo principal, a qual é periódica, pois se repete em relação ao eixo principal na direção **z**.

Assim, pode-se modelar este equipamento de forma a reduzir ao mínimo o tamanho dos elementos na malha e, ao mesmo tempo, ter um refinamento suficiente para detectar todos os detalhes físicos característicos do escoamento e da chama, sem comprometer a capacidade do computador quanto ao tempo de cálculo e a memória requerida.

A Figura 4.7 mostra o modelo geométrico da câmara de combustão testada, inicialmente concebida na ferramenta CAD do Mechanical Desktop.

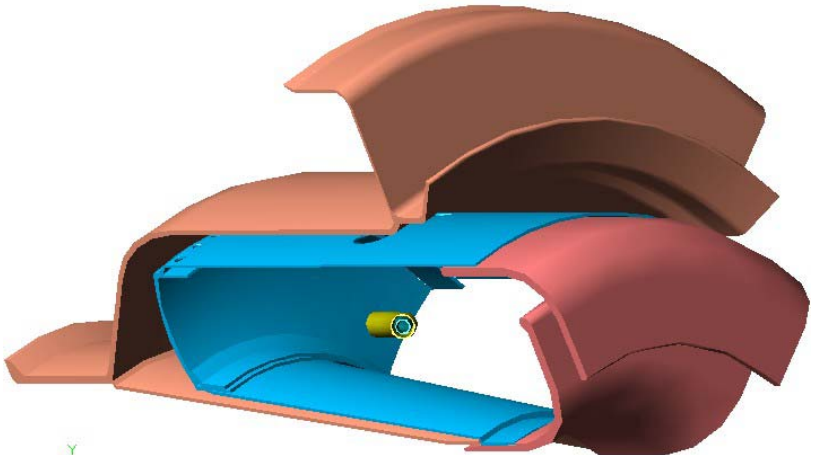
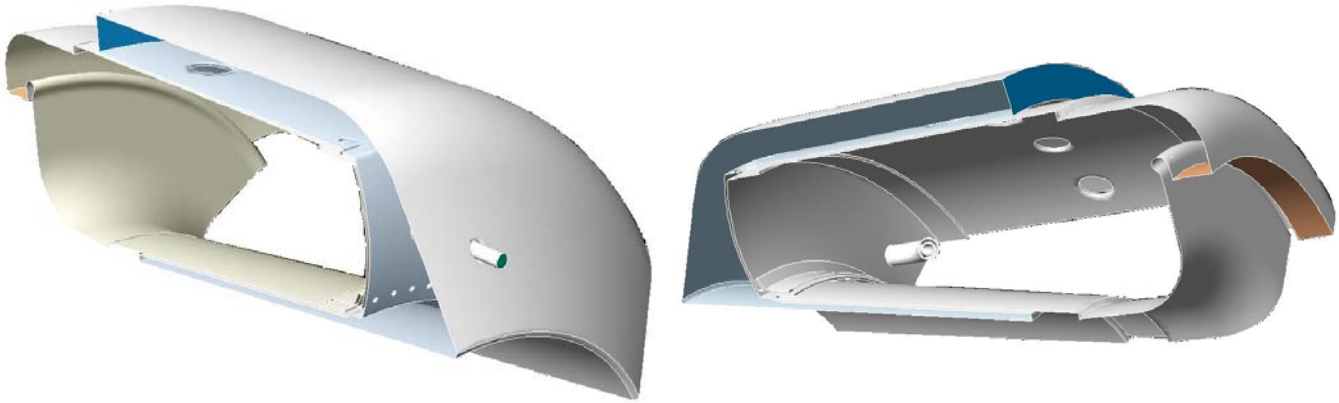


Figura 4. 7 Modelo geométrico da câmara de combustão elaborado pelo CAD no Mechanical DeskTop.

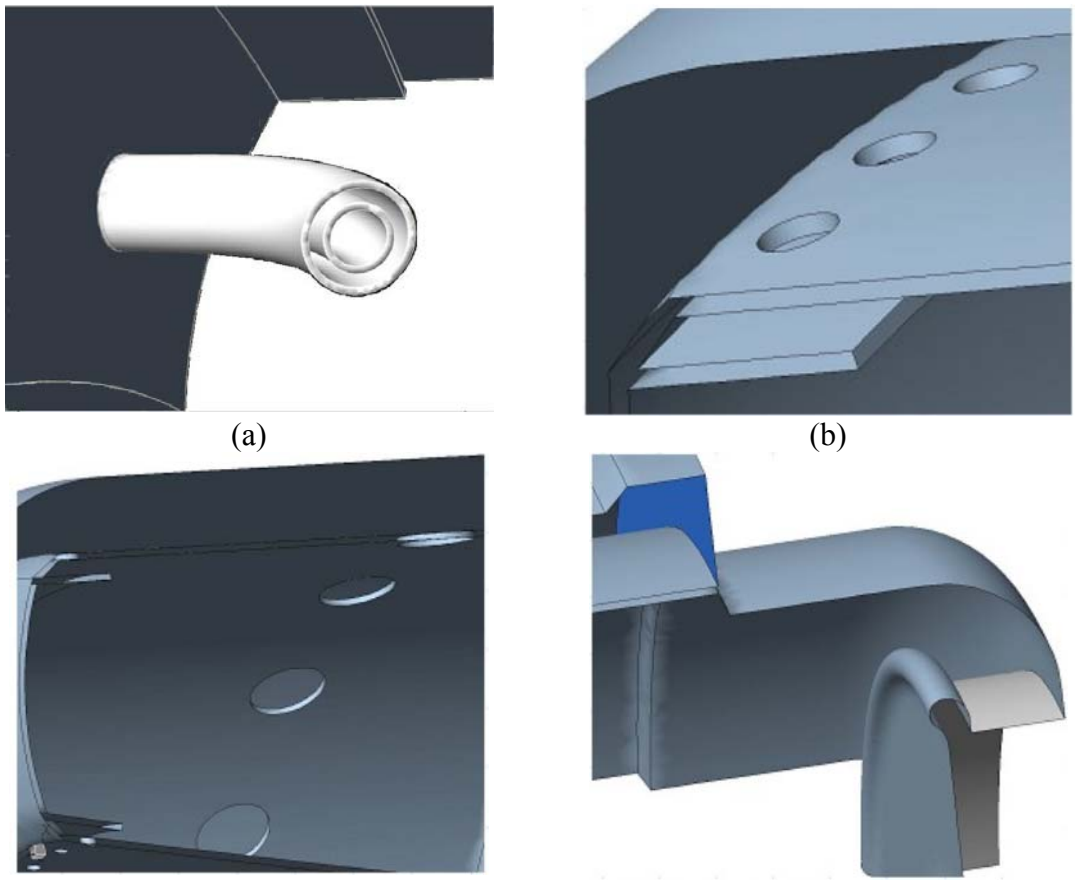
A figura 4.8 apresenta o mesmo modelo já exportado para o ANSYS CFX v.57, onde somente as superfícies que têm contacto com o fluido de trabalho são consideradas.



(a) (b)

Figura 4. 8 Modelo exportado no ANSYS CFX v.57: (a) vista frontal; (b) vista lateral

A figura 4.9 mostra detalhes da geometria deste modelo.



(a) (b)

(c) (d)

Figura 4. 9 Detalhes do modelo: (a) injetor; (b) orifícios de ar secundário; (c) orifícios do Liner; e (d) entrada de ar e exaustão do gás quente

4.5.2 Geração da Malha

A malha utilizada é do tipo tetraédrica, não estruturada, com elementos plismáticos nas proximidades de todas as paredes, apresentando cerca de 498000 nós e 2600000 elementos de volume. O fator de expansão entre os elementos da malha é constante e igual a 1,2, o qual permite descrever a camada limite nas proximidades das superfícies metálicas, usando o **Modelo Exponencial,** Fox e McDonald (1988).

A malha utilizada é apresentada na figura 4.10, a qual refere-se a uma projeção na posição longitudinal da câmara, nas proximidades do bocal de saída do injetor. Na figura 4.11, apresenta-se detalhes da mesma.

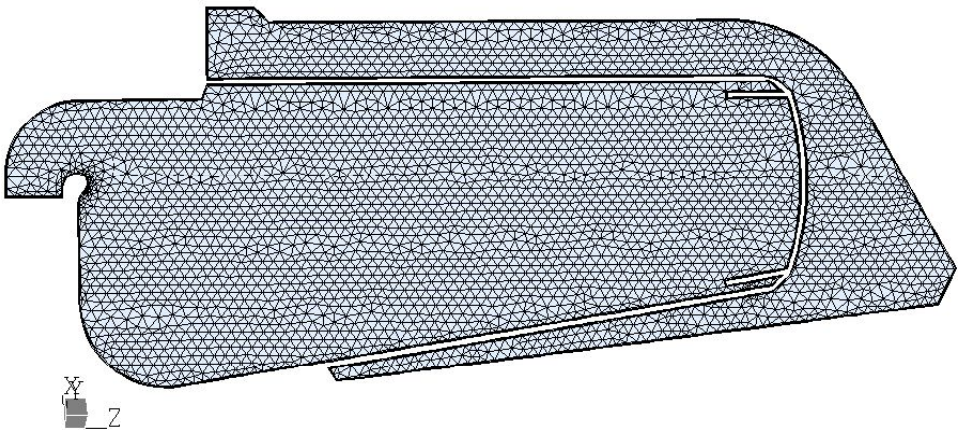


Figura 4. 10 Vista lateral da malha

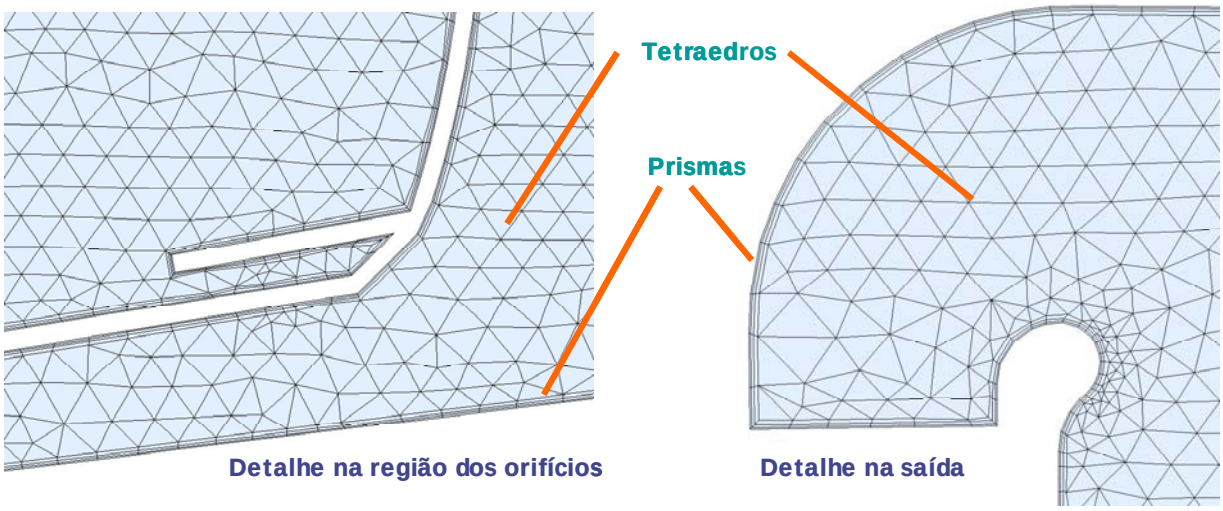


Figura 4. 11 Detalhes da malha: (a) na região próxima ao injetor; e
(b) na saída dos gases quentes

4.5.3 Estabelecimento das Condições de Contorno Iniciais

A modelagem é realizada em duas etapas: a primeira contemplando o estudo aerodinâmico, utilizando diferentes modelos de escoamento turbulento; e a segunda parte engloba os estudos termo aerodinâmicos, utilizando diferentes modelos de combustão.

Na figura 4.12, apresentam-se as superfícies de referência usadas para o estabelecimento das condições de contorno para ambas as etapas. As regiões denominadas superfícies laterais 1 e 2 referem-se às regiões onde a condição de periodicidade do tipo rotacional é estabelecida, ou seja, o CFD admite que o comportamento das variáveis termo-aerodinâmicas se repete entre estas duas superfícies, permitindo simular o comportamento da câmara de combustão completa, incluindo as demais superfícies de controle e injetores.

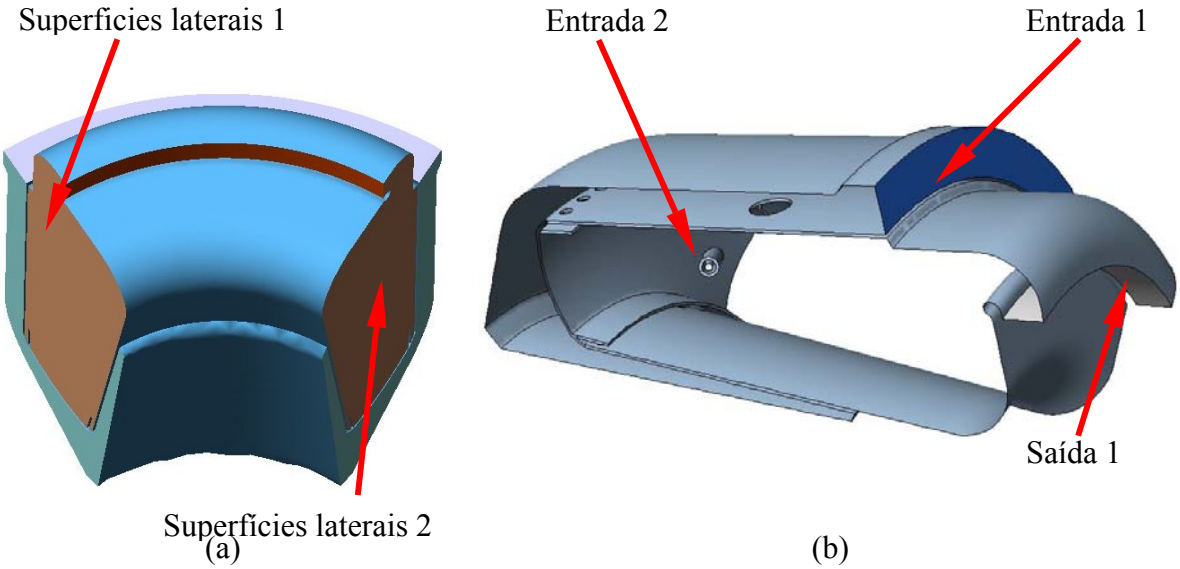


Figura 4. 12 Superfícies de controle para o segundo modelo geométrico: (a) Vista frontal; (b) Vista lateral

Para a primeira etapa, considera-se como único fluido de trabalho o ar a fim de identificar o comportamento preliminar do escoamento no interior da câmara.

A tabela 4.5 apresenta as condições de contorno adotadas para a primeira etapa da simulação, cujos valores foram baseados nos dados experimentais obtidos do modelo, sendo que o valor da vazão mássica de ar adotada corresponde a 1 / 6 da vazão mássica de ar proviniente do compressor, porque o modelo geométrico coresponde a 1 / 6 da câmara completa, em decorrência de exister 6 bicos injetores.

Tabela 4. 5 Condições de Contorno para o Estudo Aerodinâmico

Grandeza	Local	Unidade	Valor
Vazão mássica de ar	Entrada 1	kg/s	0,1593
Vazão Mássica de ar	Entrada 2	kg/s	0,0019
Pressão Relativa do ar	Saída 1	Pa	0,0
Simetria ao eixo **Z**	Superfície lateral 1	---	Periódica
Simetria ao eixo **Z**	Superfície lateral 2	---	Periódica
Fluxo de calor	Paredes	W/m^2	adibáticas
Escorregamanto	Paredes	--	Nulo
Rugosidade	Paredes	mm	Aerodinamicamente lisas

Da tabela 4.5, algumas considerações devem ser feitas: primeiro despreza-se a transferência de calor por condução pelas paredes laterais e perdda de calor para o meio ambinete ao dmitir paredes adiabáticas; segundo, as paredes são consideradas superfícies isentas de escorregamento e aerodinamicamente lisas, poque admite-se que a rugosidade absoluta é menor do que a espessura da sub-camada limite laminar; e terceiro, a adoção da

pressão relativa do ar na saída nula significa para o cálculo CFD que aquela superfície de controle está aberta para a atmosfera. Além disso, esta adoção é usual na ciência de Mecânica de Fluídos quando se tem o interesse de determinar as perdas de carga (pressão) no domínio em estudo.

A tabela 4.6 apresenta as frações mássicas que devem ser utilizadas na especificação do fluido de trabalho gás natural adotado neste trabalho para a realização do estudo termo-aerodinâmico, com base nos dados da Tabela 4.4 coletados pelo GASEQ ® v 7.6.

Tabela 4. 6 Dados fornecidos pelo GASEQ ® v 7.6 para Definição dos Fluidos de Trabalho no CFX

Parâmetro	[1]
Fração mássica de CH_4 no combustível	0,774
Fração mássica de C_2H_4 no combustível	0,165
Fração mássica de O_2 no ar	0,232

Na tabela 4.6, as frações mássicas do metano e do propano foram calculadas considertando a massa de cada um dividido pela massa total do combustível gás natural adotado, segundo a reação global de combustão apresentada pelo GASEQ ® v 7.6.

Além disso, as condições de contorno adotadas para a segunda etapa usando o gás natural assumem os valores apresentados pela tabela 4.7, considerando a condição ambiental de Itajubá (pressão 91630 [Pa,] com temperatura média 22 [°C] e altitude 840 [m]).

Tabela 4. 7 Condições de Contorno para o gás natural no estudo Termo-Aerodinâmico pelo CFX

Grandeza	Local	Unidade	Valor
Vazão mássica de ar	Entrada 1	kg/s	0,1593
Temperatura do ar		K	473
Vazão Mássica do combustível	Entrada 2	kg/s	0,019
Temperatura do combustível		K	295
Pressão Relativa do Gás quente	Saída 1	Pa	0,0
Simetria ao eixo **Z**	Superfície lateral 1	---	Periódica
Simetria ao eixo **Z**	Superfície lateral 2	---	Periódica
Fluxo de calor	Paredes	W/m^2	Adiabática
Escorregamanto	Paredes	--	Nulo
Rugosidade	Paredes	mm	Aerodinamicamente lisas

Para concluir a definição das condições de contorno do problema físico, a Tabela 4.8 apresenta dados sobre as frações mássicas a partir do GASEQ ® v 7.6, que são solicitadas pelo programa CFX v 5.7 ® durante a definição das condições iniciais do cálculo.

Os valores da Tabela 4.8 são calculados considerando a massa total dos produtos da combustão do gás natural. A quantidade em massa para cada espécie é dividida pelo valor da

massa total dos produtos. Exceção para as frações mássicas do metano e etano, os quais são calculados em relação à massa total do combustível, enquanto para o oxigênio em relação à massa total do ar.

Tabela 4. 8 Fração mássica dos produtos da combustão do gás natural para a definição das condições iniciais no CFX a partir do GASEQ ® v 7.6

Espécies	Frações mássicas [1]
CO_2	0,117
H_2O	0,122
CO	0,041
NO	0,0003

Além disso, é necessário também especificar nas condições iniciais do problema sobre o valor da Temperatura de Extinção e/ou Corte da Chama. Dados experimentais indicam que esta temperatura encontra-se entre 900 [K] e 1200 [K], dependendo do tipo de combustível, segundo Williams (1985). O valor adotado neste trabalho é uma temperatura da ordem de 1200 [K] para o gás natural, conforme Smith *et al* (1992).

4.5.4 Especificação do Modelo de Escoamento

A especificação do modelo matemático mais adequado para representar o comportamento aerodinâmico do escoamento, por exemplo, em câmaras de combustão, já é um trabalho oneroso computacionalmente em vista da complexidade geométrica e das condições adversas envolvidas, que podem ser combinadas com a geração de diferentes níveis de refinamento de malhas dentro de um ciclo iterativo de acerto e erro, com a finalidade de atingir uma melhor aproximação entre dados numéricos e dados experimentais conhecidos.

Nesta validação, utiliza-se como referência o trabalho desenvolvido pela Israel Instutite of Technology (IIT) em conjunto com Imperial College of Science Technology & Medicine (ICSTM), CINAR Ltd. (CINAR), Instituto Superior Técnico de Portugal (ISTP), Institute of Fundamental Technological Research (IPPT-PAN), ANSALDO Ricerche Srl, B&B AGEMA Gmbh (B&B_AGEMA), Rheinish-Westfaelische Technische Hochschule Aachen (RWTH), e Caldaie Italy (CCA-I) em 2003, que consiste no projeto de desenvolvimento de câmaras de combustão de baixa emissão de NOx.

A Figura 4.13 apresenta a câmara de combustão do projeto Floxcom utilizada nos testes experimentais, enquanto a Figura 4.14 mostra o modelo geométrico utilizado nas

simulações em CFD para a validação da malha e dos modelos matemáticos citados no capítulo 3 para o escoamento turbulento, em destaque para k-ε; RNG k-ε e SST.

O modelo geométrico da câmara é um setor que corresponde a 1/12 do modelo completo, possuindo duas entradas de ar e uma entrada para o combustível, todos com distribuição radial e transversal em relação ao eixo central.

Figura 4. 13 Câmara de combustão experimental

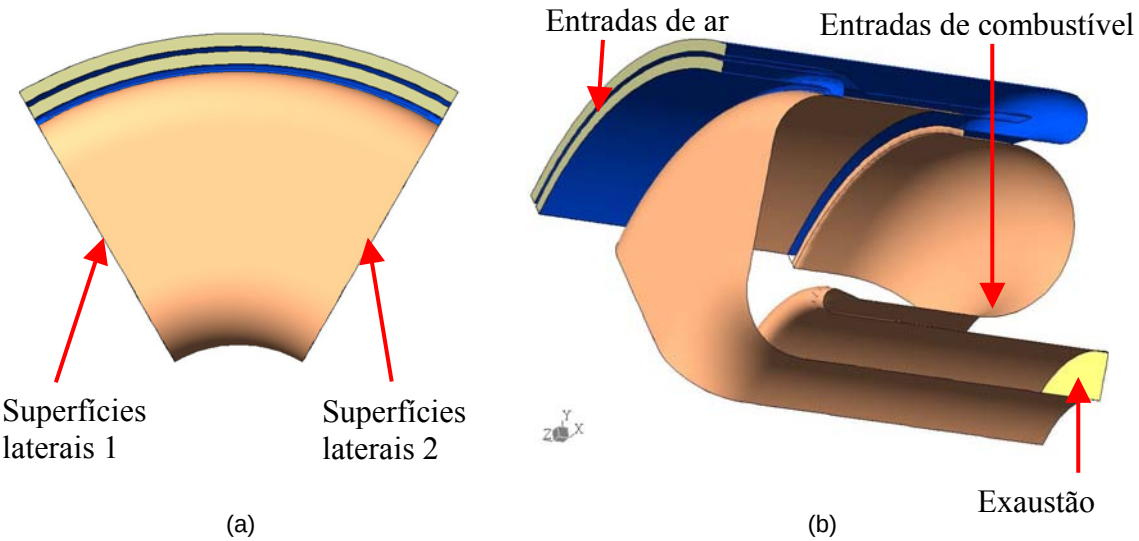


Figura 4. 14 Câmara de combustão Floxcom criada no CFX: (a) Vista frontal; (b) Vista lateral

Para o projeto Floxcom, a malha adotada neste trabalho é do tipo não-estruturada formada por elementos tetraédricos. O efeito da camada limite é discretizado usando uma malha de elementos plismáticos com espessura variando segundo um modelo exponencial com fator de expansão igual a 1,20. O fluido de trabalho é ar nas condições normais de temperatura e pressão 25 (°C) e 1 (atm), respectivamente.

Para as condições de contorno são adotadas:

a) Entradas de ar possuem velocidade de 10 (m/s);

b) Exaustão apresenta pressão média relativa nula, porque se considera que o escoamento é direcionado para a atmosfera;

c) As superfícies laterais 1 e 2 referentes à pré-câmara e câmara de combustão, respectivamente, são interfaces periódicas em relação ao eixo z; e

d) As demais superfícies são paredes consideradas lisas aerodinamicamente e sem escorregamento.

O erro alvo adotado para estabelecer a condição de convergência é de 10^{-4}.

Os cálculos realizados pelo processo de validação aerodinâmica usam um computador da marca DELL com dois processadores XEON de 2,8 GHz e memória de 4 GBytes de RAM.

A validação na câmara da Floxcom consiste em duas fases: a primeira, avaliar a melhor malha que permita obter melhor precisão da magnitude da velocidade media do escoamento em pontos específicos da câmara em relação aos dados experimentais; e a segunda fase, conhecida a melhor malha, checar a precisão dos modelos de aproximação do escoamento turbulento.

O estudo aerodinâmico no projeto Floxcom é efetuado através do levantamento do campo de velocidades e a distribuição da magnitude da velocidade ao longo de um conjunto de pontos de referência, distribuídos longitudinalmente na câmara, a fim de verificar os efeitos decorrentes da recirculação. Estes pontos de referência são especificados pela Fig 5.4.

Somente a partir deste trabalho de validação é possível verificar o modelo matemático a ser utilizado na simulação do escoamento na câmara de combustão anular da Solar Turbines.

4.5.5 Especificação do Modelo de Combustão

De maneira análoga ao realizado para os modelos de aproximação de escoamentos turbulentos no item 4.5.4, os modelos de aproximação da combustão também devem ser testados e validados em relação aos dados experimentais conhecidos.

Nesse trabalho, adota-se como referência dois experimentos, como segue:

- Experimento 1 sobre uma câmara FLOX^{tm}:

Este experimento realiza-se sobre uma cârmara de combustão de baixa emissão, denominada Queimador FLOX^{tm}, o qual foi desenvolvida por Wunning (1996), que também realizou comparações entre dados numéricos e experimentais..

Esta câmara consiste de um cilindro de seção circular de raio interno igual a 0,5 [m] e altura de 1,0 [m], dotado de um injetor de combustível de diâmetro 9 [mm], o qual é circundado por seis injetores de ar com diâmetro 8.5 [mm]. Apresenta sensores capazes de medir a distribuição radial de temperatura, tubos de resfriamento das paredes de uma fornalha e uma válvula de ar. A Figura 4.15 mostra esta bancada de teste.

O combustível utilizado é gás metano, o qual é injetado com velocidade de 25 [m/s], enquanto o ar é injetado com velocidade de 100 [m/s].

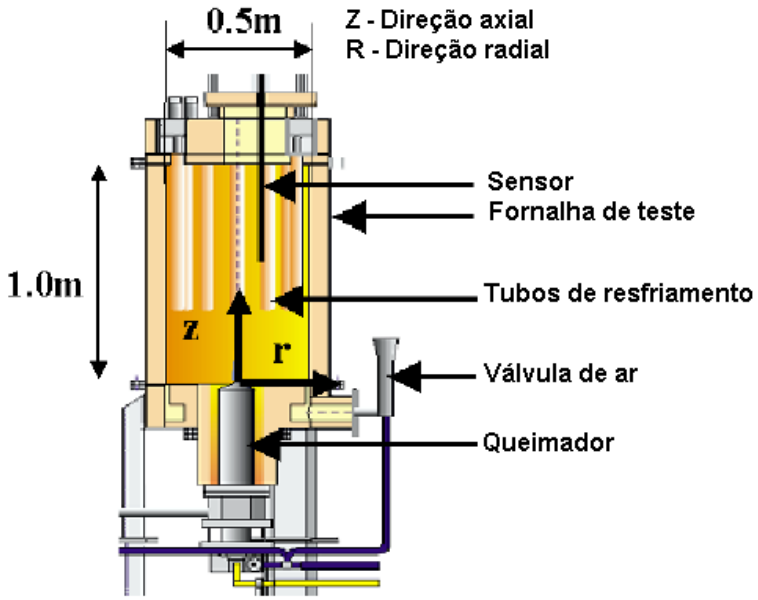


Figura 4. 15 Bancada de teste utilizada pelo Experimento 1, Wunning (1996)

A previsão e a medição da distribuição de temperatura é efetuada para 4 posições axiais (Z = 50, 200, 400 e 950 [mm]).

Com relação ao tipo de chama, a mesma é do tipo não pré-misturada, porque nesta bancada de teste a mistura ar e combustível se realiza somente na zona de combustão. Como o gás metano tem alta taxa de mistura com o ar, este experimento aplica dois modelos de combustão: o FM ("Flamelet Model") e o FRCM ("Fast Rate Chemistry Model").

- Experimento 2 sobre uma Fornalha de Alta Temperatura:

Este experimento foi realizado pela International Flame Research Foundation em uma fornalha HITAC ("high temperature air combustion"), segundo Weber *et al* (1999).

Esta câmara consiste de um cilíndro de seção circular com diâmetro de 280 [mm] e comprimento de 640 [mm], dotada de 4 injetores com diâmetro de 10 [mm] onde é injetado uma mistura de ar e gases produtos da combustão parcial do gás natural em uma pré-câmara cilíndrica de seção circular com diâmetro de 124 [mm].

A pré-câmara de combustão também possui uma válvula Bypass, a qual é utilizada para equalizar a pressão.na saída desta pré-câmara com a pressão ambiente, bem como ajustar a quantidade de gases quentes que podem ser usados na câmara de combustão.

O ar misturado com os gases quentes é injetado com velocidade de 87 [m/s] por uma admissão lateral entre a pré-câmara e a fornalha. Como existem resquícios de gás natural, a mistura é novamente queimada dentro da fornalha. A Figura 4.16 mostra esta bancada de teste.

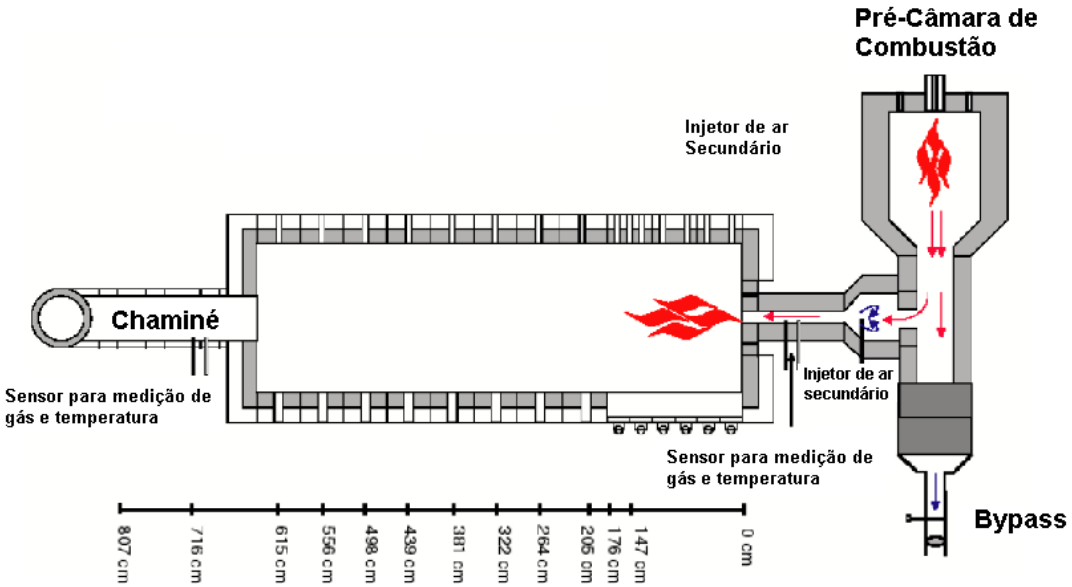


Figura 4. 16 Bancada de teste utilizada pelo Experimento 2, Weber et al (1999)

A previsão e a medição da distribuição de temperatura é efetuada para 5 posições axiais (x = 0.15, 0.43, 0.73, 2.05 e 4.98 [m]).

Com relação ao tipo de chama, a mesma também pode ser do tipo não pré-misturada, porque dentro da fornalha a mistura ar e combustível se realiza somente na zona de combustão. Os modelos de combustão testados são: o FM (“Flamelet Model”) e o FRCM (“Fast Rate Chemistry Model”).

Somente a partir destes trabalhos de validação é possível verificar o modelo matemático a ser utilizado na simulação da combustão na câmara de combustão anular da Solar Turbines.

No modelo de câmra de combustão anular da Solar Turbines, o injetor Venturi utilizado para os combustíveis líquidos querosene e/ou diesel (ver figura 4.5) não é aplicado, sendo já substituído por uma injeção de ar e de combustível feita de modo direto (ver figura 4.9.a), em analogia aos injetores típicos para combustíveis gasosos, Lefebvre (1983).

Contudo, é importante frisar que esta configuração tende a proporcionar uma mistura ar e combustível somente na zona de combustão, dando uma indicação de que a chama a ser gerada seja do tipo não pré-misturada.

Por outro lado, considerando a Razão de Equivalência na mistura (ϕ = **(a/f) / (alf)$_{estequio.}$**), não se pode deixar de considerar a possibilidade do comportamento termo-aerodinamico se assemelhar a uma chama fracamente pré-misturada (ver Capítulo 2), ou seja, apresenta velocidade da chama próxima da velocidade do escoamento da mistura e a temperatura máxima da chama tende a ser menor do que a temperatura máxima na chama não pré-misturada ou difusiva.

Desta forma, é necessário não somente utilizar o melhor modelo de aproximação da combustão encontrado pelos dois experimentos de validação citados anteriormente, mas também considerar a possibilidade de utilizar um segundo modelo para comparação, em vista da eventualidade de simular combustão com chama fracamente pré-misturada (por exemplo, EDM), em conformidade as condições de contorno apresentadas pela tabela 4.7.

A caracterização da chama é efetuada pela comparação entre estes modelos de combustão com o levantamento dos campos de velocidade, pressão e temperatura, que permitem determinar a posição, o volume e o alcance da chama no interior da câmara de combustão.

Com relação ao mecanismo da reação para o fluido de trabalho adotado (gás natural), a reação de combustão pode ser realizada com até dois passos para os componentes gás metano e etano, fixado **Número de Lewis** igual a unidade para todas as espécies químicas, conforme esquemas de Westbrook e Dryer (1981), onde uma das etapas aparece um componente adicional passivo representado pelo gás nitrogênio (N_2). A representatividade da reação de combustão pode ser preservada, mesmo utilizando-se este mecanimo de reação reduzido, conforme confirmam Hamer e Roby (1997) e Parente et al (2004).

Além disso, conforme observado no item 3.3.2, a modelagem da combustão adotará inicialmente o tempo químico médio da ordem de 0,003 [s] para os modelo EDM.

4.5.6 Especificação do Modelo de Variação da Energia

Esta especificação depende da análise aerodinâmica da câmara testada. A partir desta análise, pode-se obter o valor da magnitude da velocidade média do escoamento no domínio a fim de calcular o numero de Mach.

Se este valor for maior do que 0,20, o modelo de variação da energia a ser utilizado para a análise termo-aerodinâmica deve ser o "Total Energy". Caso contrário, o "Thermal Energy", conforme detalhado no capítulo 3, item 3.3.4.

A região de referência adotada para o cálculo da magnitude da velocidade média do escoamento é na entrada da pré-câmara ou câmara de resfriamento. A temperatura de referência utilizada no cálculo do Número de MAch também é obtida nesta mesma região, em função das condições de contorno definidas pelo item 4.4.3.

4.5.7 Especificação do Modelo de Radiação

Neste trabalho, como não se considera a existência de fuligem, os quais têm capacidade para afetar a propagação da radiação no meio a partir da zona de combustão, pode-se adotar que o meio é transparente para a radiação.

Admitindo que as paredes da câmara testada possuem emissividade total, refletindo toda a radiação que recebem para o meio fluido, bem como são não catalíticas, ou seja, não afetam as reações, os modelo de transferência de calor por radiação que podem ser testados são: DTM ("*Discrete Transfer Model*") e P1.

Os modelos DTM e P1 podem ser usados porque a radiação interfere no meio somente através do aquecimento das paredes, uma vez que o meio é considerado transparente. Os demais modelos de radiação são mais apropriados para meios semi-transparentes ou opacos.

Desta forma, o Modelo Espectral adotado é o **Modelo Gray** por causa do espectro da radiação ser uniforme, devido à ausência de fuligem.

Por outro lado, sobre o modelo de dispersão da radiação e/ou "*Scattering Model"*, pode-se admitir que a radiação é isotrópica, considerando que cada elemento da malha pode emitir, no mínimo, 8 raios de radiação a partir do seu centro, em todas as direções, conforme detalhado pelo item 3.3.4.

4.5.8 Especificação das Condições de Convergência

Conforme visto no capítulo 3, a qualidade do resultado obtido pelo CFD depende da especificação adequada das condições de convergência (número de iterações e erro alvo).

Para o caso da simulação termo-aerodinâmica de uma câmara de combustão, as condições de convergência adotadas são mostradas pela tabela 4.9.

Tabela 4. 9 Condições de convergência aplicadas

Parâmetro	Descrição
Tempo numérico da simulação	0,025 [s]
Número total de iterações adotado	300
Erro – Alvo adotado	10^{-4}

Na tabela 4.9, o erro alvo adotado para estabelecer a condição de convergência representa um critério de parada para os cálculos, uma vez que o desvio (erro estatístico) calculado pelo CFD sobre as projeções da velocidade do escoamento no sistema de coordenada cartesiano, vazão mássica, turbulência, energia dissipada pela Turbulência, transferência de calor por radiação e emissões atingem valores inferiores ao erro-alvo. Este valor para a simulação da combustão pode variar entre 10^{-4} a 10^{-6}.

Além disso, o tempo físico adotado é igual a 0,025 [s] porque consiste em um valor próximo do valor médio dos tempos de residência das reações de combustão, os quais variam entre 0.005 a 0.040 [s], para combustíveis ricos em metano, tal como o gás natural, conforme Teodora *et al*. (1998).

Desta forma, após expor no presente capítulo os critérios para especificação dos modelos de escoamento turbulento, de combustão e de transferência de calor por radiação para a realização do Cálculo da Dinâmica de Fluidos Computacional em modelos de câmara de combustão, apresentado o modelo geométrico, a malha adotada e as condições de contorno iniciais e as condições de convergência, o próximo capítulo expõe os resultados referentes aos trabalhos de validação dos modelos de aproximação do escoamento e da combustão e das análises termo – aerodinâmicas sobre a câmara de combustão da Solar Turbines.

Capítulo 5

ANALÍSE DOS RESULTADOS

Neste capítulo, apresentam-se os resultados obtidos pela simulação em um modelo de câmara de combustão do tipo anular de uma micro turbina a gás da fabricante Solar Turbines, a qual se encontra instalada e instrumentada no Laboratório de Sistemas Térmicos do Núcleo de Excelência em Sistemas Térmicos e Geração Distribuída (NEST) na Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI).

Apresentam-se, também, os resultados obtidos pelos processos de validação termo-aerodinâmica dos modelos de escoamento e de combustão em CFD adotados por este trabalho em relação à três casos experimentais, sendo um referente à um estudo aerodinâmico sobre uma câmara de combustão também anular de baixa emissão de NOx do Projeto Floxcom, segundo Israel Institute of Technology *et* al (2003), e dois casos referentes aos estudos termo-aerodinâmicos realizados sobre um queimador FLOX, Wunning (1996), e sobre uma Fornalha de Alta Temperatura HITAC ("High Temperature Air Combustion"), segundo Weber *et al* (1999).

5.1 Validação do CFD

5.1.1 Validação Aerodinâmica

Considerando as condições de cálculo definidas pelo item 4.5.4, a tabela 5.1 apresenta as características principais das três malhas testadas sobre o modelo de câmara de combustão

do projeto Floxcom da Israel Institute of Technology *et* al (2003), utilizando inicialmente o modelo de escoamento turbulento RNG k-ε.

Tabela 5. 1 Malhas testadas segundo o tamanho do elemento de volume e das condições de convergência.

	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Comprimento do maior lado do elemento na malha de volume (mm)	2,76	2,75	2,70
Quantidade de elementos	817890	826303	869693
Número de iterações	120	120	120
Duração do cálculo	01:49 h	01:42 h	02:06 h

Nas Figuras 5.1 a 5.3, são apresentadas as distribuições longitudinais da velocidade média do escoamento na câmara Floxcom para as malhas 1, 2 e 3 definidas pela Tabela 5.1.

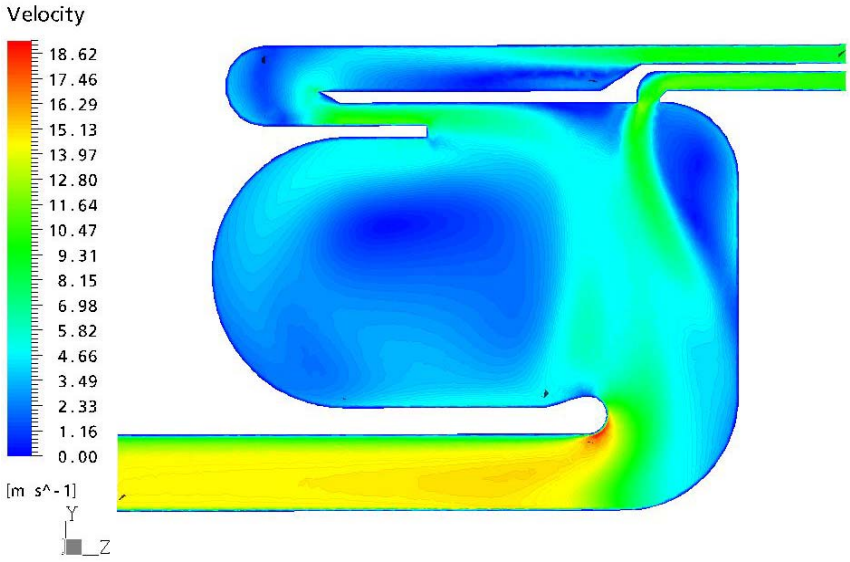


Figura 5. 1 Distribuição de velocidade média do escoamento para a malha 1

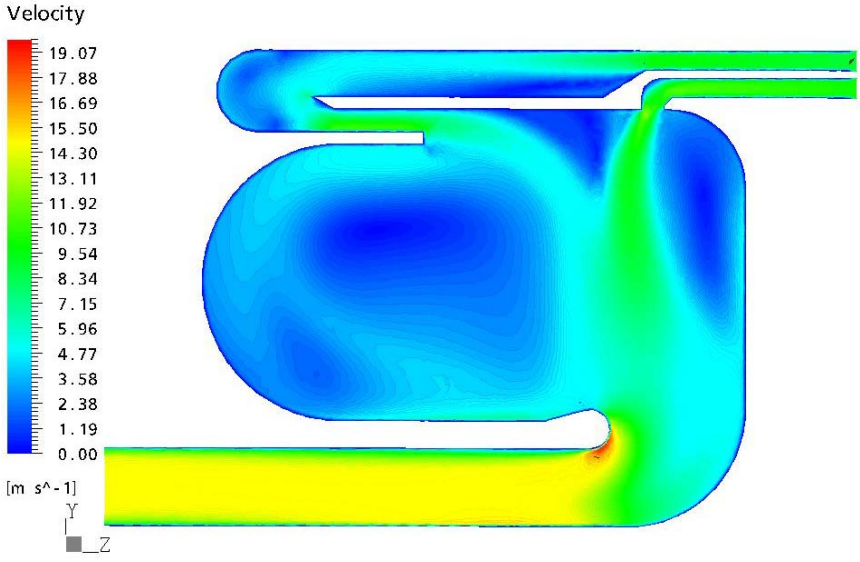


Figura 5. 2 Distribuição de velocidade média do escoamento para a malha 2

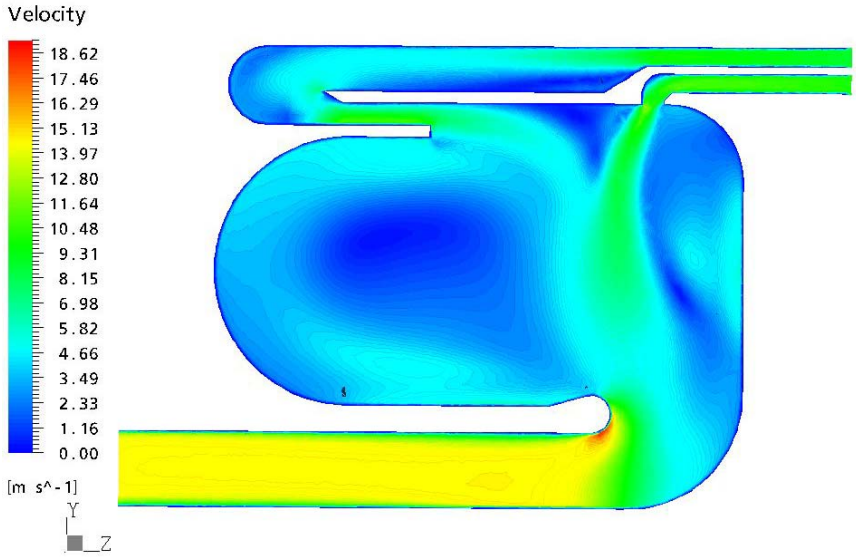


Figura 5. 3 Distribuição de velocidade média do escoamento para a malha 3

A Figura 5.5 apresenta a magnitude de velocidade média adimensional do escoamento ao longo de alguns pontos de referência com posição **x/L**, onde **L** é igual a 139 (mm). A velocidade de referência para o escoamento é a velocidade na entrada de ar.

Estes pontos de referência são mostrados na Figura 5.4 e são utilizados para verificar a precisão entre os valores obtidos pela simulação numérica e os dados experimentais (curva tracejada) para as malhas 1, 2 e 3 definidos pela Tabela 5.1, identificadas por GM 2.76, GM 2.75 e GM 2.70, respectivamente.

A curva experimental tracejada é obtida pela técnica denominada "Particle Image Velocimetry" (PIV), que consiste num mapeamento em alta freqüência do campo de velocidade nos escoamentos, baseado na visualização da luz laser refletida por partículas de baixa massa específica (alumina ou glicerina, por exemplo) que são imersas no escoamento. Em conjunto com um anemômetro de fio quente, esta técnica permite medir a magnitude (módulo) da velocidade instantânea do escoamento.

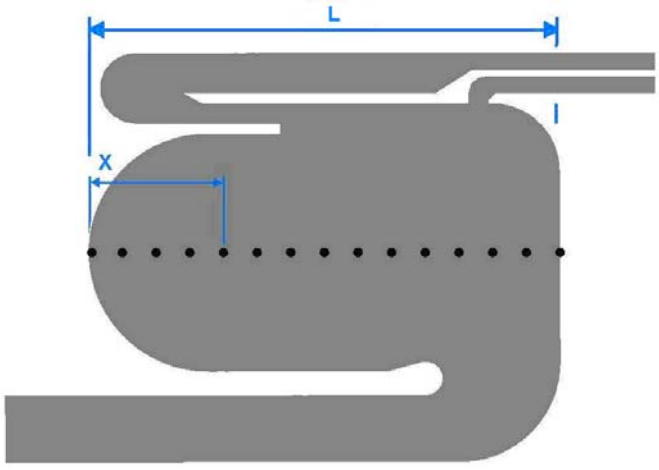


Figura 5. 4 Pontos de referência na câmara Floxcom

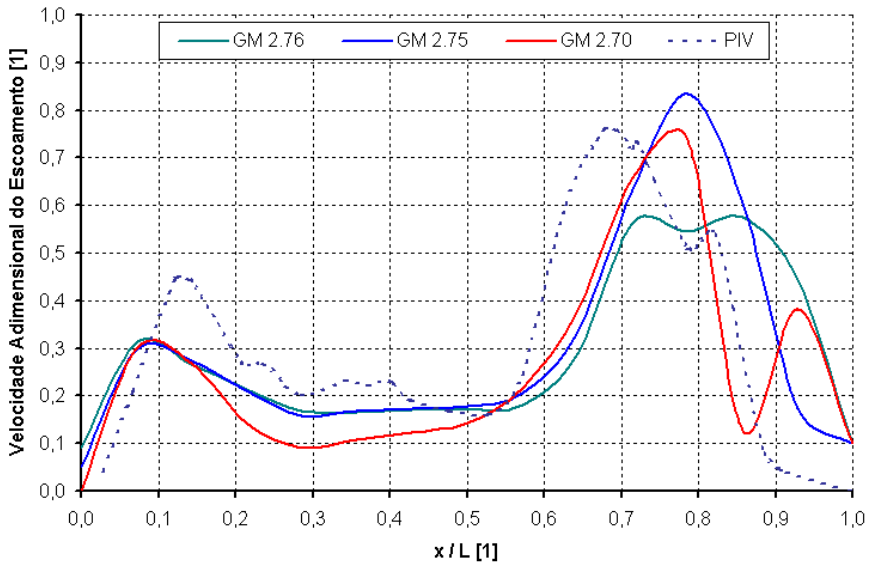


Figura 5. 5 Magnitude da velocidade média adimensional do escoamento ao longo da câmara Floxcom para as malhas 1,2 e 3, identificadas por GM 2.76, GM 2.75 e GM 2.70, respectivamente, em relação aos dados experimentais (curva tracejada) do Projeto FLOXCOM

A Figura 5.6 apresenta a diferença entre os valores numéricos para as três malhas da Tabela 5.1 em relação aos dados experimentais.

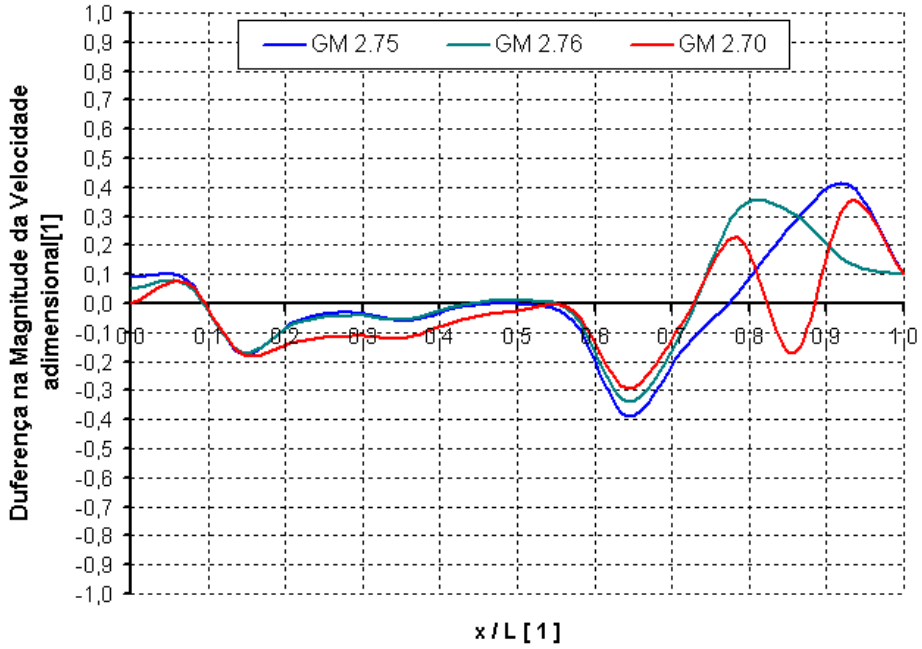


Figura 5. 6 Diferença das magnitudes da velocidade média adimensional do escoamento na câmara Floxcom para as malhas 1, 2 e 3 com comprimento do maior lado do elemento de volume iguais a 2,76 (mm), 2,75 (mm) e 2,70 (mm), respectivamente em relação aos dados experimentais

Da Figura 5.6, identifica-se que a melhor malha é a n° 2 com elemento de volume com lado igual a 2,75 (mm), porque apresenta a menor diferença (erro) em relação aos dados experimentais. A imprecisão ou desvio médio padrão para a malha n° 2 é igual a 0,043 [m/s].

Da Figura 5.5, a Malha n° 1 apresenta o maior desvio ao longo dos pontos de referência, enquanto a malha n° 3 com elemento de volume com lado igual a 2,70 (mm) não é usada, porque possui uma diferença maior em relação ao valor obtido experimentalmente. Este resultado mostra que é necessário se tomar certo cuidado na escolha da malha, porque a mesma é capaz de provocar mudanças na precisão do resultado.

Nesta condição, pode-se proceder à validação do modelo de turbulência. Os tempos de processamento encontrados para um número total de iterações igual a 120 para os modelos de turbulência k-ε, RNG k-ε e SST testados são 1:13h, 1:42h e 1:50 h, respectivamente.

Nas Figuras 5.7 a 5.9, apresentam-se as distribuições de velocidade média do escoamento adimensional no plano longitudinal da câmara do projeto Floxcom para diferentes modelos de turbulência, considerando como referência a malha n° 2.

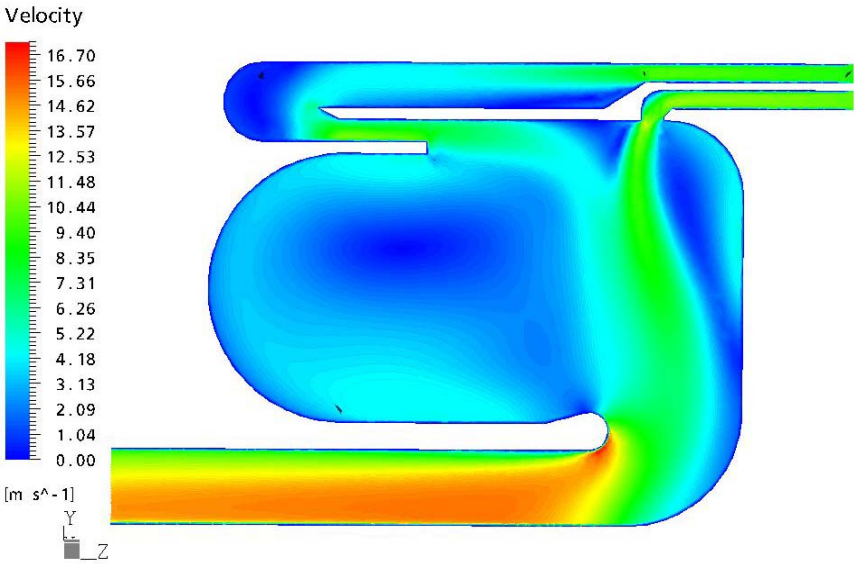


Figura 5. 7 Modelo k-ε:- Distribuição de velocidade média.

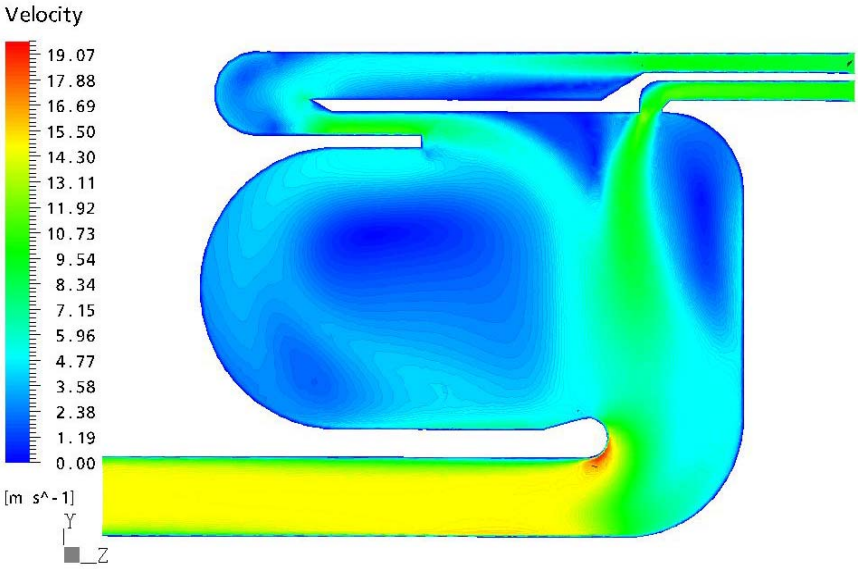


Figura 5. 8 Modelo RNG k-ε - Distribuição de velocidade média.

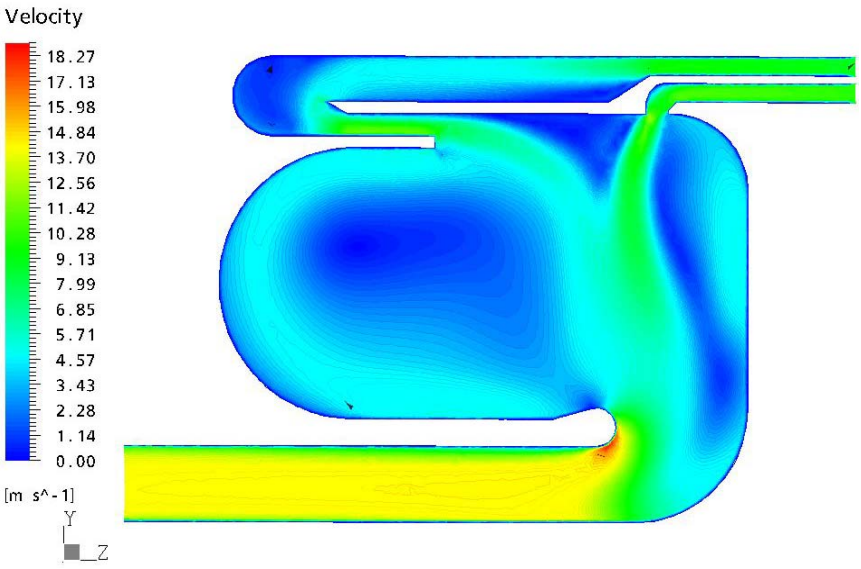


Figura 5. 9 Modelo SST - Distribuição de velocidade média.

A Figura 5.10 apresenta a magnitude da velocidade média adimensional do escoamento (calculada pelo modulo da velocidade resultante entre as projeções das velocidades do escoamento nas direções **x**,**y** e **z**) para os pontos de referência definidos pela Figura 5.6, para checar a precisão dos valores numéricos obtidos pelos modelos de turbulência testados em relação aos dados experimentais (curva tracejada) obtidos pelo Projeto FLOSCOM. A velocidade de referência para o escoamento também considera a velocidade da entrada de ar.

Nesta fase, identifica-se que apesar do modelo k-ε ter atingido a convergência preliminar para um baixo erro alvo da ordem de 10^{-4} com 80 iterações, não consegue obter um resultado representativo do comportamento físico, Figura 5.10, uma vez que apresenta um

desvio significativo nos valores da magnitude da velocidade adimensonal do escoamento em relação aos demais modelos de turbulência, Figura 5.11.

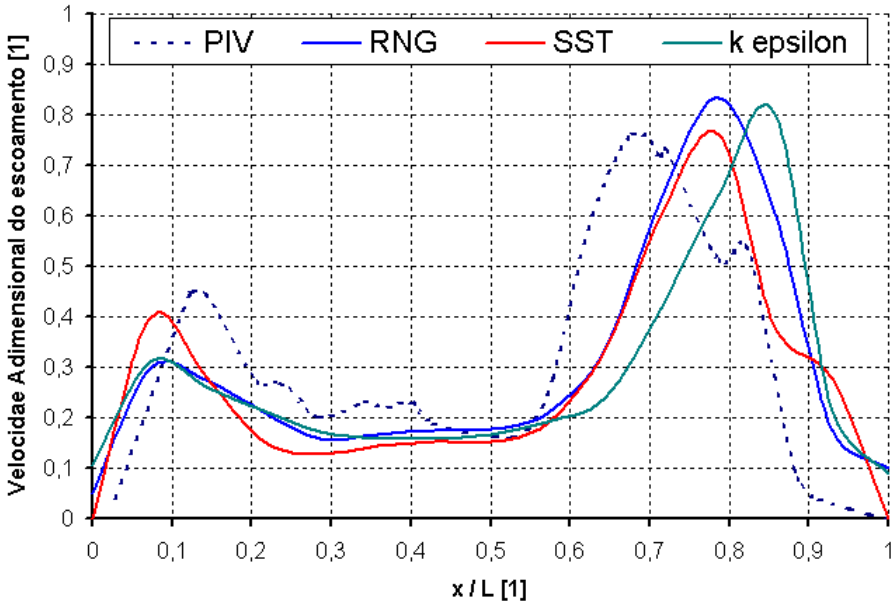


Figura 5. 10 Magnitude da velocidade media adimensional do escoamento ao longo da câmara Floxcom para diferentes modelos de turbulência em relação aos dados experimentais (curva tracejada).

A figura 5.11 apresenta o desvio entre as magnitudes da velocidade média adimensional do escoamento para os diferentes modelos de turbulência.

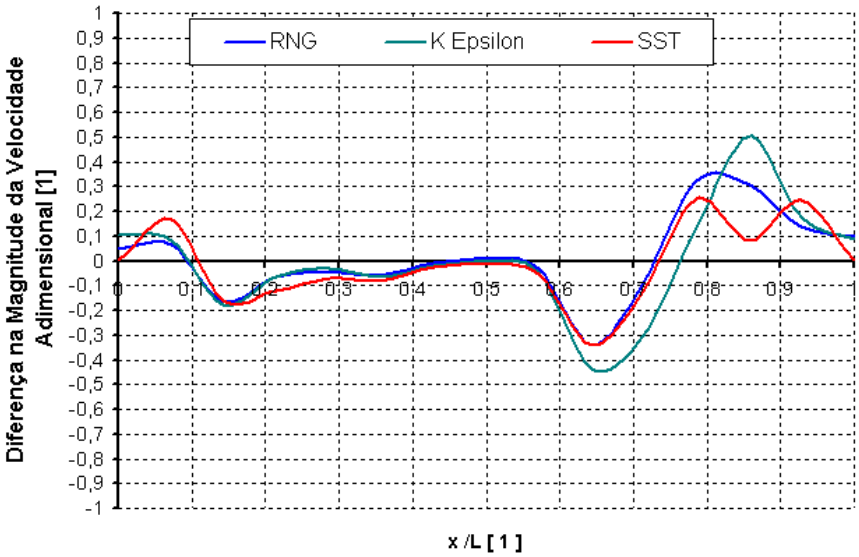


Figura 5. 11 Diferença das magnitudes da velocidade média adimensional do escoamento na câmara Floxcom para diferentes modelos de turbulência em relação aos dados experimentais

Da Figura 5.11, identifica-se que o melhor modelo de turbulência para a câmara de combustão é o SST, porque apresenta a menor imprecisão ou Desvio Médio Padrão, cujo valor é 0.040 [m/s].

Nestas condições, o CFD fornece um indicativo que o modelo de escoamento turbulento que pode ser aplicado na câmara de combustão do tipo anular testada neste trabalho é o SST, porque o mesmo apresenta a característica positiva de ter maior precisão.

5.1.2 Validação Termo Aerodinâmica

Considerando as condições de cálculo definidas pelo item 4.5.5, apresentam-se a seguir os resultados obtidos para queimador FLOX, Wunning (1996), e sobre uma Fornalha de Alta Temperatura HITAC ("High Temperature Air Combustion"), segundo Weber *et al* (1999).

- Experimento 1 sobre a câmara FLOX^{tm}:

A Figura 5.12 mostra as distribuições de temperatura médias no interior da câmara obtidas pelo teste experimental e pelos modelos de combustão FM e FRCM.

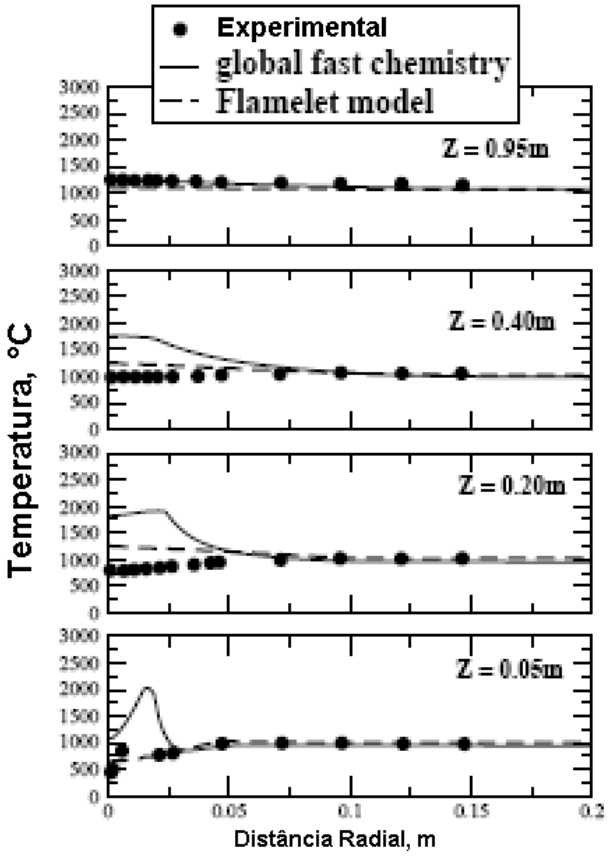


Figura 5. 12 Distribuição de temperatura radial obtida pelo teste experimental e pelos modelos de combustão para o experimento 1, Wunning (1996)

Neste experimento, o FRCM (“Fast Rate Chemistry Model”) permite prever uma temperatura máxima da chama em aproximadamente 2030 [K] em torno de uma pequena região, onde a fração de mistura pode ser estequiométrica.

Por outo lado, o FM (“Flamelet Model”) permite prever o local, onde a chama se desprende e apresenta alta velocidade do escoamento a partir da saída do queimador. Além disso, o FM também permite caracterizar melhor a distribuição da temperatura. De fato, nota-se na Figura 5.15 que este modelo de combustão acompanha praticamente em todas as posições a tendência de temperatura obtida experimentalmente. Mesmo na região de maior desvio (precisão inferior a 90 [%]), equivalente à posição axial **Z** igual a 0,20 (m) e para as posições radiais **R** inferiores a 0,05 [mm], que corresponde a zona onde a chama apresenta a maior temperatura, este modelo de combustão apresenta melhor aproximação do que o FRCM.

- Experimento 2 sobre a Fornalha de Alta Temperatura:

A Figura 5.13 mostra as distribuições de temperatura média no inteiror da fornlha pelo teste experimental e pelos modelos de combustão FRCM r FM.

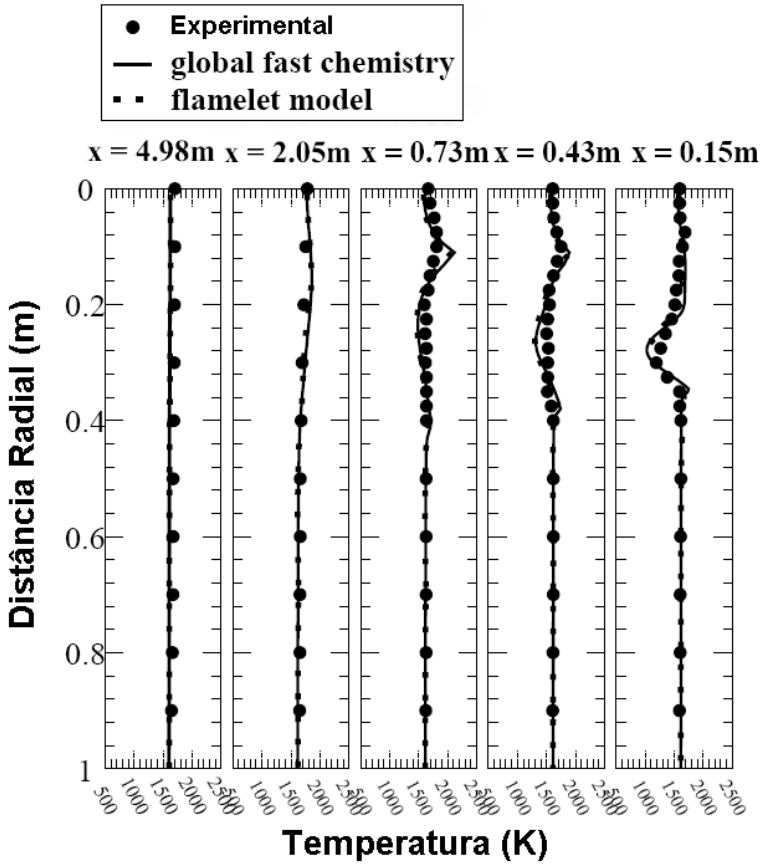


Figura 5. 13 Distribuição de temperatura do ar obtida pelo teste experimental e pelos modelos de combustão para o experimento 2, Weber et al (1999)

Neste experimento, tanto o FRCM ("Fast Rate Chemistry Model") quanto o FM ("Flamelet Model") permitem obter boas previsões de temperatura. De fato, constata-se pela Figura 5.13 que estes dois modelos de combustão acompanham praticamente em todas as posições a tendência de temperatura obtida experimentalmente, apresentando precisões acima de 90 [%].

5.2 Resultados sobre o Estudo Aerodinâmico da Câmara de Combustão Testada

Conforme item 5.1.1 sobre o processo de validação do CFD para estudos aerodinâmicos de câmaras de combustão, o modelo de turbulência adotado é SST para a condição de regime permanente no ponto de projeto da câmara de combustão do tipo anular da Solar Turbines.

A Figura 5.14 apresenta o aspecto das curvas de convergência (erro numérico) obtidas para a simulação aerodinâmica, após 2000 iterações. As curvas contemplam as projeções da velocidade nas direções **x**, **y** e **z**, calculadas pela técnica conhecida por RMS ("Root Mean Square"), respectivamente, RMS U-Mom, RMS V-Mon e RMS W-Mom, bem como da vazão mássica e quantidade de movimento, RMS P-Mass.

Esta técnica RMS é obtida pelo cálculo da raiz quadrada da soma dos quadradros das diferenças entre o valor numérico obtido numa dada interação com o valor obtido na interação anterior, durante o processamento do cálculo. Este valor é podenrado em função também do volume dos elementos que formam a malha. A ordem de grandeza do RMS pode variar entre 10^{-3} a 10^{-7}, depedendo da malha e das aproximações matemáticas adotadas.

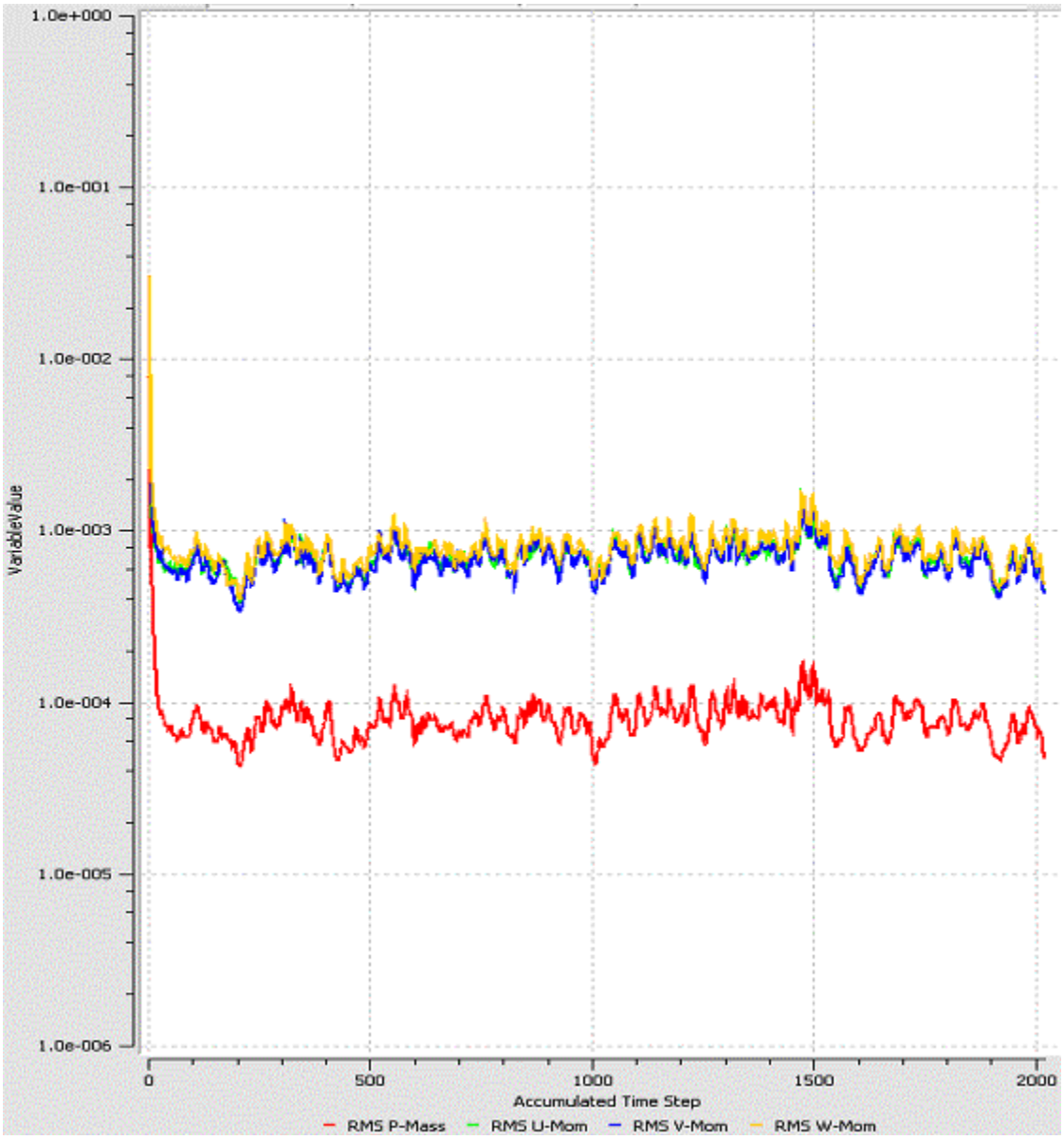


Figura 5. 14 Aspecto da curva de convergência obtida após 2000 iterações para a simulação aerodinâmica da câmara de combustão anular, utilizando modelo de turbulência SST

Nota-se da Fig. 5.14 que a curva de erro para as projeções da velocidade do escoamento nas direções **x**, **y** e **z**, respectivamente, RMS U-Mom, RMS V-Mon e RMS W-Mom, bem como da vazão mássica e quantidade de movimento, RMS P-Mass, apresentam valores que se estabilizam para ordens de grandeza inferiores a 10^{-3}, caracterizando um cálculo com razoável convergência.

Apesar da baixa convergência ($> 10^{-4}$) para as projeções da velocidade do escoamento, este resultado ainda pode ter aplicação na maioria dos projetos de engenharia, conforme indicam Shaw (1992) e Bardina *et al* (1997) com relação ao cálculo dos erros pelo RMS.

Contudo, o ideal seria obter erros inferiores a 10^{-5}, se fosse possível manipular a geometria para obter malhas mais refinadas. Isto não foi possível para este trabalho, porque

não se disponha de computador capacitado (processamento paralelo com mais de 3 GHz com memória RAM superior à 4 GB, pelo menos) para resolver este tipo de problema

Apesar das limitações encotradas, pode-se realizar uma análise sobre o comportamento aerodinâmico da câmara de combustão anular testada. As Figuras 5.15 e 5.16 mostram as distribuições das velocidades médias e vetor velocidade para a analise aerodinâmica, as quais já apresentam indicativo sobre a formação de quatro regiões com escoamentos típicos, os quais são indicados pelas Zonas A, B, C e D, bem como os efeitos da recirculação.

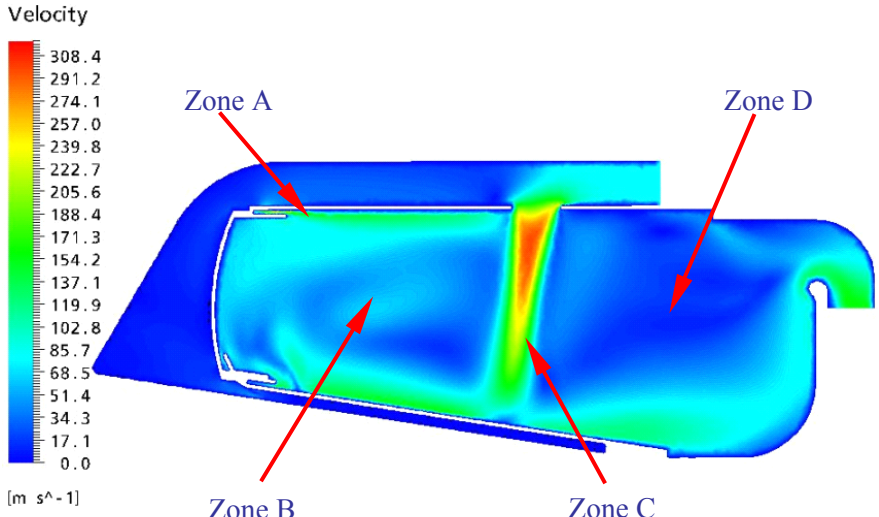


Figura 5. 15 Distribuição de velocidade média ao longo de um plano longitudinal na câmara de combustão anular utilizando o modelo de turbulência SST, com identificação de quatro regiões com escoamentos típicos.

Na Figura 5.15, identificam-se quatro regiões com escoamentos típicos: a primeira é representada pelos orifícios primários próximos ao injetor, onde uma camada de ar é usada para o resfriamento das paredes internas (Zona A); a segunda é representada pelo escoamento rotativo próximo ao injetor (Zona B); a terceira é representada por um jato de ar formado pelo orifício lateral do tubo de chama (Zona C); e a quarta região por um escoamento rotativo próximo à exaustão (Zona D).

Este comportamento pode ser diretamente associado com a formação de duas regiões distintas, cada uma com uma recirculação no escoamento, como é mostrado na Figura 5.16. Enquanto uma recirculação está concentrada próximo ao injetor, uma segunda recirculação está próxima a exaustão.

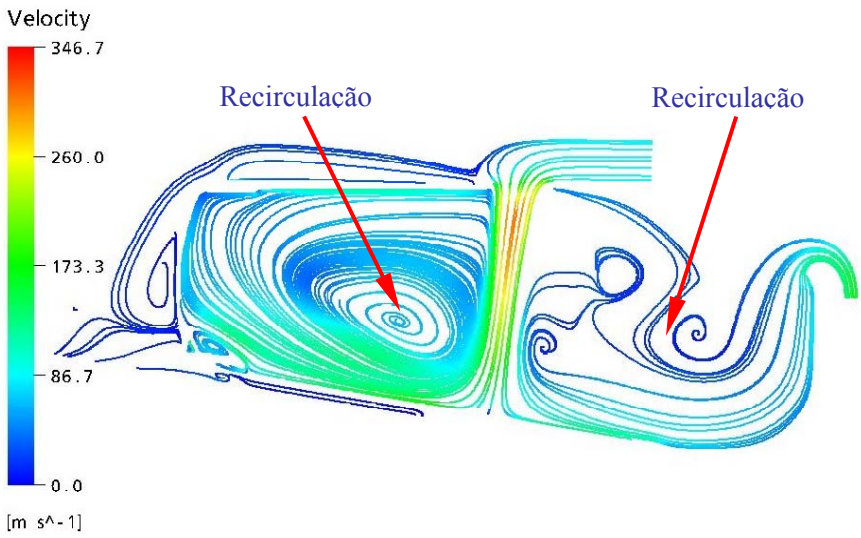


Figura 5. 16 Vetor velocidade média ao longo de um plano longitudinal na câmara de combustão anular utilizando o modelo de turbulência SST

Na Figura 5.16, a recirculação localizada próximo ao injetor cria uma região com baixa pressão, o que pode contribuir para a formação de uma zona potencial para a dinâmica da mistura entre combustível e oxidante e a ancoragem da chama. Além disso, a recirculação próxima à exaustão pode contribuir para a diluição dos gases quentes produtos da combustão.

A Figura 5.17 apresenta a magnitude da velocidade média adimensional **v/vmax** ao longo dos pontos de referência adotados em um plano longitudinal na câmara de combustão anular, com posição dada por **x/L** para L igual a 159 (mm), os quais são mostrados pela Figura 5.18. Este plano encontra-se passando no meio de um dos orifícios laterais do tubo de chama.

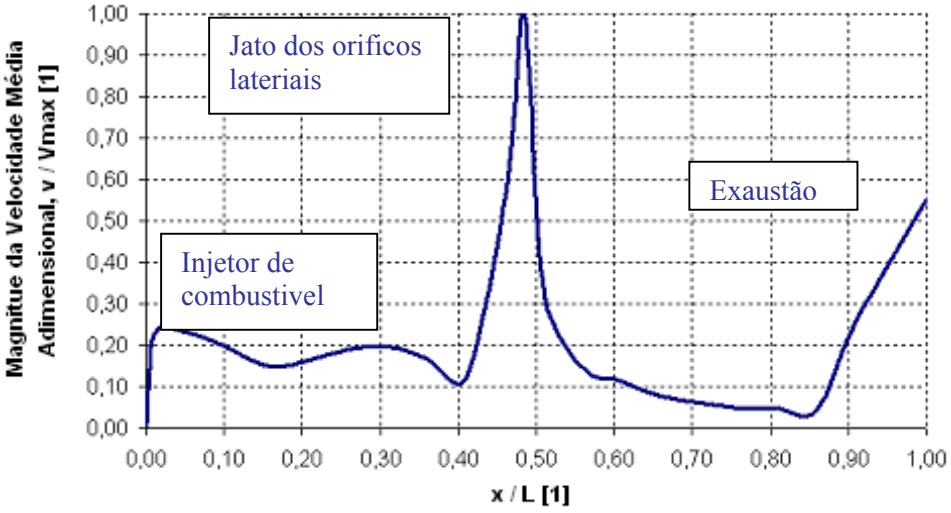


Figura 5. 17 Magnitude da velocidade média adimensional ao longo de um plano longitudinal na câmara de combustão anular utilizando o modelo de turbulência SST com escoamento em regime permanente e nas condições nominais de projeto.

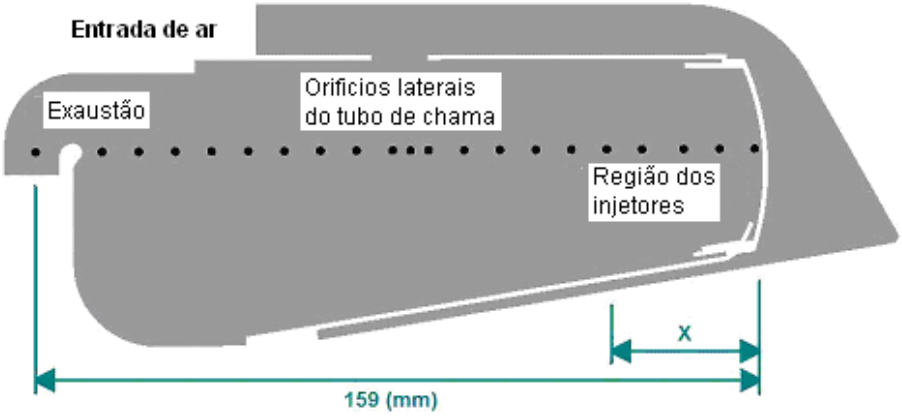


Figura 5. 18 Pontos de referência na câmara de combustão anular da Solar Turbines.

Na Figura 5.18, nota-se que o jato do orifício lateral do tubo de chama apresenta alta influência no campo de velocidade, principalmente nas posições dos pontos localizados entre x/L = 0,40 e x/L = 0,60 da câmara de combustão, onde a magnitude da velocidade média adimensional do escoamento apresenta intensa variação.

Ademais, da Figura 5.18 é possível identificar que a partir da posição x/L = 0,85 a velocidade média adimensional aumenta gradativamente devido à redução na seção transversal do escoamento na direção da exaustão.

A Figura 5.19 mostra a distribuição da pressão total relativa (equivalente à soma da pressão estática relativa e da pressão dinâmica) ao longo do plano longitudinal definido pela Figura 5.18.

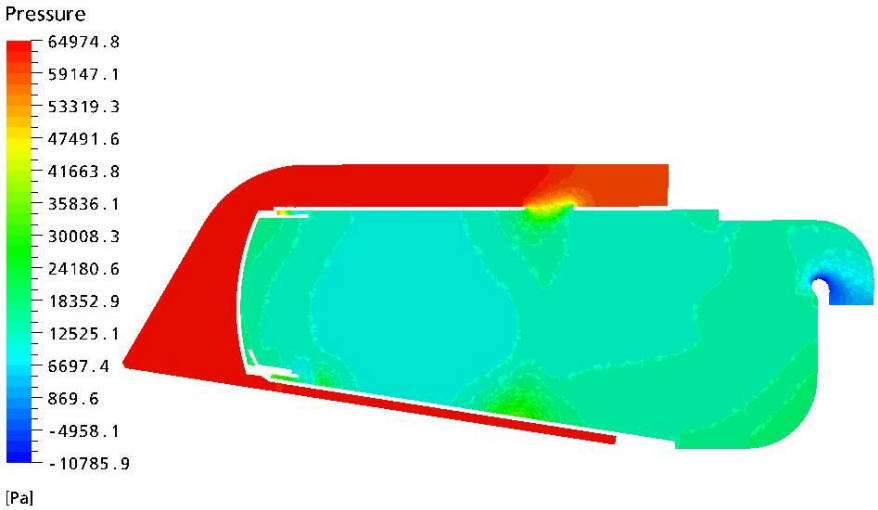


Figura 5. 19 Distribuição de pressão total relativa ao longo de um plano longitudinal na caâmra de combustão anular da micro turbina do NEST utilizando o modelo de turbulência SST em regime permanente e nas condições nominais de projeto

Na Figura 5.19, identifica-se um intenso gradiente de pressão em relação à posição do orifício lateral do tubo de chama. Conseqüentemente, o jato de ar pode ser formado da carcaça

externa que agrega a pré-câmara até a região interna do tubo de chama, cujos efeitos são conhecidos da Figura 5.15 a 5.17 com relação às regiões de formação de recirculação.

Neste escoamento, a Razão de Perda de Pressão Total através da câmara de combustão em relação à pressão total na entrada de ar $\Delta P/P_{ENT} = (p_{ent} - p_{sai})/(p_{ent} + P_b)$ é, aproximadamente, igual a 0,46, sendo **Pb** a pressão de referência ambiente (101325 [Pa]).

A Figura 5.20 apresenta a distribuição de pressão média relativa do escoamento ao longo de dois planos transversais na câmara posicionados em x/L = 0,25 e x/L = 0,50, conforme Figura 5.18.

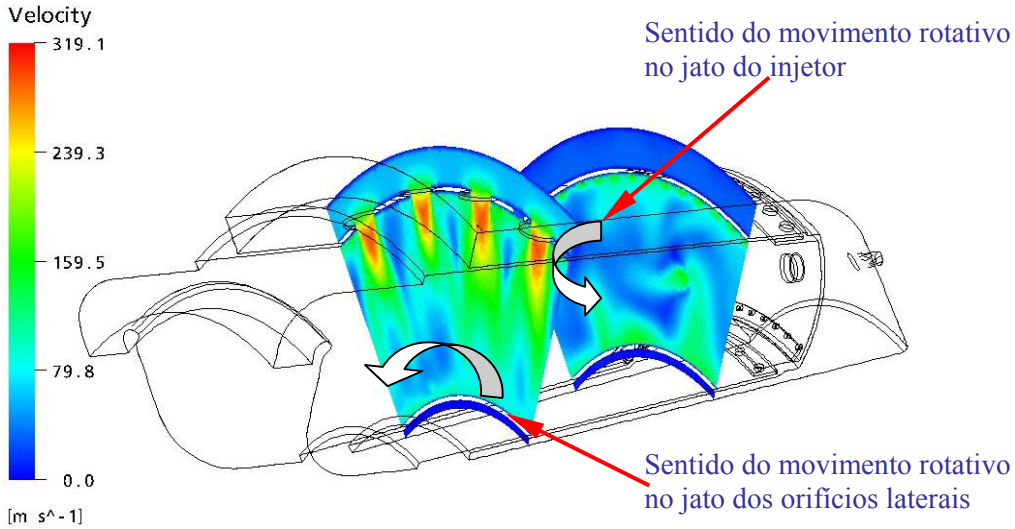


Figura 5. 20 Magnitude da velocidade média relativa ao longo de dois planos tranversais na câmara de combustão da solar turbines nas posições x/L = 0,25 e x/L = 0,50

Na Figura 5.20, identifica-se que existe um escoamento secundário devido ao movimento rotativo em torno do eixo **z**, que induz um desvio na direção do escoamento dos jatos, seja no injetor de combustível, seja nos orifícios laterais do tubo de chama, onde seu efeito é pequeno, todavia pode afetar o tempo de residência do escoamento da chama formada na combustão.

Na Figura 5.21, é apresentada a distribuição de velocidade em um plano paralelo ao eixo do injetor.

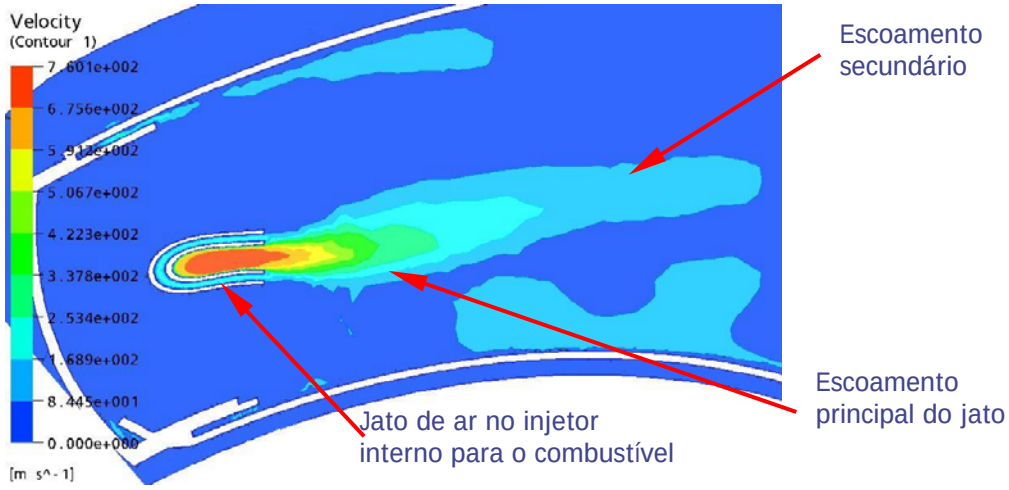


Figura 5. 21 Campo de velocidade em um plano paralelo ao eixo de um injetor

Da Figura 5.21, pode-se identificar que o escoamento do jato formado a partir do injetor praticamente permanece inalterável até atingir um alcance entre 6 a 8 vezes o diâmetro do injetor interno do combustível, quando seu escoamento passa a ser afetado pelo escoamento secundário no interior da câmara.

Outro fenômeno identificável que pode afetar o tempo de residência da chama é a formação de vórtices na região próxima da saída do injetor, dependendo da quantidade de combustível injetado, da espessura do tubo interno do combustível em relação à espessura do tubo externo de ar no injetor e, principalmente, do escoamento secundário de natureza rotativa, o qual preenche todo o domínio interno da câmara.

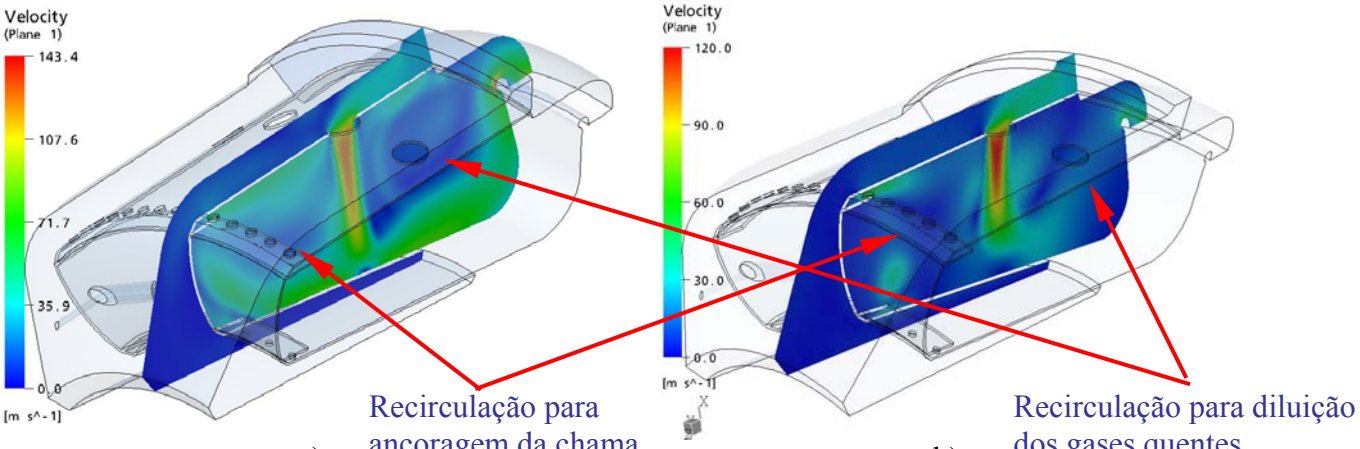
Desta forma, é importante rastrear os efeitos decorrentes destes vórtices na saída do injetor, cujo alcance é pequeno e pode atingir distâncias entre 0,7 a 1,5 vezes o diâmetro do tubo interno de combustível no injetor.

5.3 Resultados sobre o Estudo Termo Aerodinâmico da Câmara de Combustão Testada

Este estudo está dividido em duas etapas: a primeira etapa contempla a aplicação dos modelos de combustão EDM e FM usando somente como combustível o gás metano; e a segunda etapa realiza a aplicação destes modelos de combustão usando como combustível o gás natural (aqui representado pela composição formada por gás metano e gás etano, conforme definido no capítulo 3). Para ambas as etapas, os cálculos são efetuados para a condição de regime permanente no ponto de projeto.

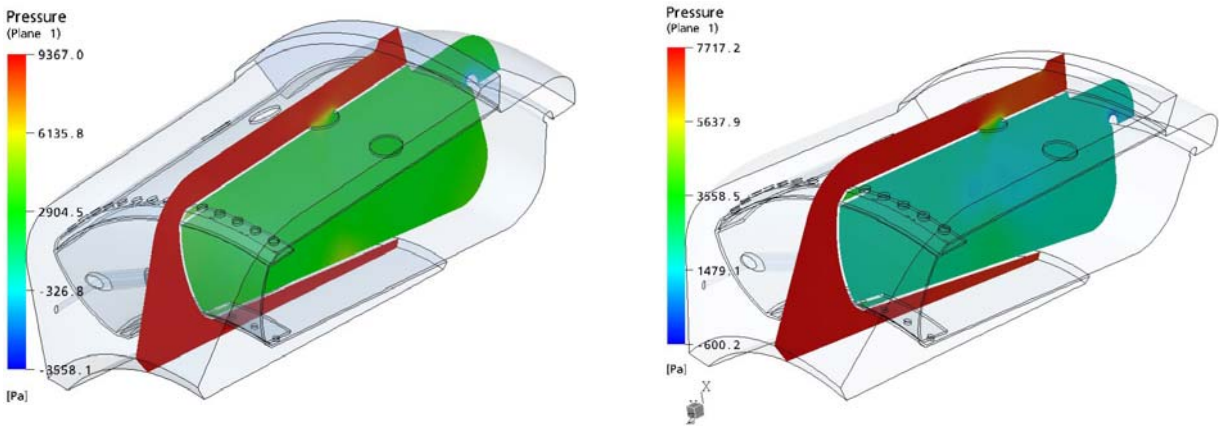
5.3.1 Resultados para os Modelos de Combustão EDM e FM utilizando Gás Metano

As Figuras de 5.22 a 5.24 apresentam os campos de pressão média relativa, velocidade média e temperatura total média projetados sobre um plano longitudinal obtidos pelos modelos EDM e FM, respectivamente.



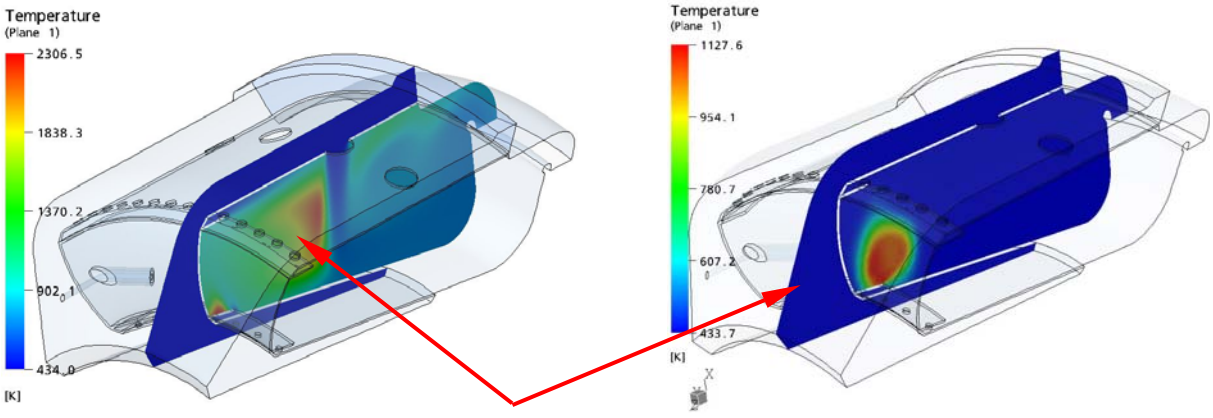
a) b)

Figura 5. 22 Campos de velocidade média: a) EDM; b) FM



a) b)

Figura 5. 23 Campos de pressão média relativa: a) EDM; b) FM



a) b)

Figura 5. 24 Campo de temperatura total média: a) EDM; b) FM

Das Figuras 5.22 a 5.24, verifica-se que a posição da chama é afetada pela existência de recirculaçção no escoamento nas proximidades do injetor, influenciando a sua ancoragem e o controle do tempo de residência. Isto pode ser comprovado pela concnetração das mais altas temperaturas no interior da câmara nas proximidades do injetor.

Uma sugunda região de recirculação do escoamento também é identificada nas proximidades da exaustão, o que afeta a diluição dos gases quentes produtos da combustão.

Considerando a posição do plano longitudinal indicado nas Figuras 5.22 a 5.24, pode-se efetuar o levantamento da variação da velocidade média, pressão relativa média e temperatura total média ao longo de um eixo **X** a partir do injetor, cuja posição está definida pela Figura 5.25. Nas Tabelas 5.2 e 5.3, são apresentados os valores obtidos ao longo deste eixo para os modelos de combustão EDM e FM, respectivamente.

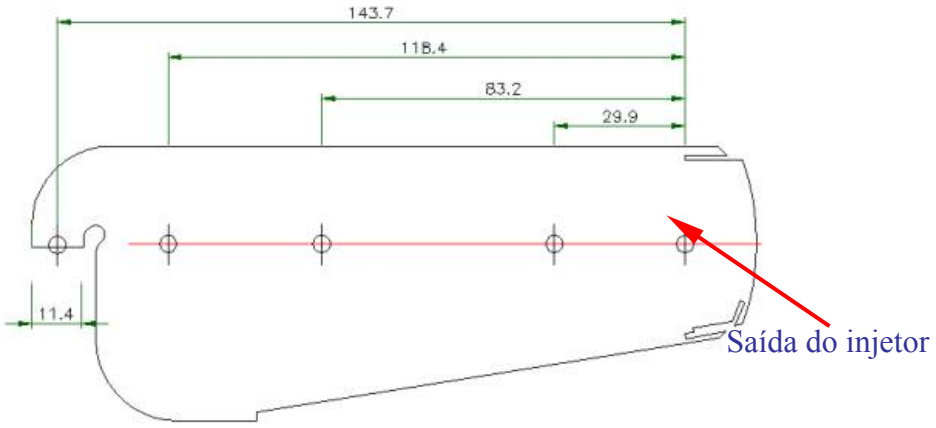


Figura 5. 25 Localização do eixo de referência **X** a partir da saída do injetor (à direita) na direção longitudinal da câmara.

Tabela 5. 2 Resultados obtidos para o modelo de combustão EDM

Grandeza	Símbolo	Unidade	Valores				
Posição em relação ao injetor	X	mm	**0**	**30**	**83**	**118**	**144**
Velocidade média do escoamento	$V_{GÀS}$	m/s	52	45	32	27	62
Pressão relativa média do gás	$P_{GÁS}$	Pa	2350	3200	3800	4100	0
Temperatura total média do gás	$T_{GÀS}$	K	1180	2306	1285	1083	903
Densidade do Gás	$\rho_{GÁS}$	kg/m^3	0,35	0,18	0,36	0,42	0,52

Tabela 5. 3 Resultados obtidos para o modelo de combustão FM

Grandeza	Símbolo	Unidade	Valores				
Posição em relação ao injetor	X	mm	**0**	**30**	**83**	**118**	**144**
Velocidade média do escoamento	$V_{GÀS}$	m/s	42	32	29	24	58
Pressão relativa média do gás	$P_{GÁS}$	Pa	1750	2140	2700	3800	0
Temperatura total média do gás	$T_{GÀS}$	K	1127,6	2012,6	1117,7	753	706,7
Densidade do Gás	$\rho_{GÁS}$	kg/m^3	0,3	0,8	0,83	0,87	0,9

Além disso, para o modelo EDM, a temperatura máxima da chama e a temperatura média do gás quente na exaustão são, respectivamente, 2403 [K] e 903 [K], enquanto para o modelo FM são, respectivamente, 2016 [K] e 707 [K]. Pelo item 4.4, o programa GASEQ® v 7.2 indica que a temperatura adiabática da chama é igual 2183 [K]. A comparação entre as estas temperaturas da chama mostra que o modelo de combustão FM obteve a maior aproximação.

Também, pode-se identificar da Fgiura 5.24 que a distribuição de temperatura denota que a frente de chama aparentemente não compromete a integridade física das paredes do tubo de chama, graças ao sistema de ar de diluição que impede que a frente de chama se aproxime das paredes metálicas.

Considerando os dados fornecidos pelas Tabelas 5.2 e 5.3, pode-se também determinar as curvas características da câmara de combustão funcionando com gás metano para ambos os modelos de combustão, de forma representativa, como é apresentado pelas Figuraa 5.26 a 5.28 com relação ao no plano longitudinal de referência (ver Figura 5.25).

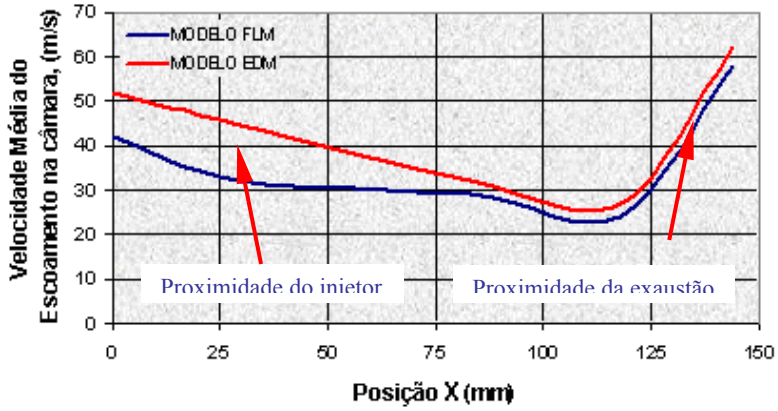


Figura 5. 26 Representação da velocidade média característica da câmara funcionando com gás metano

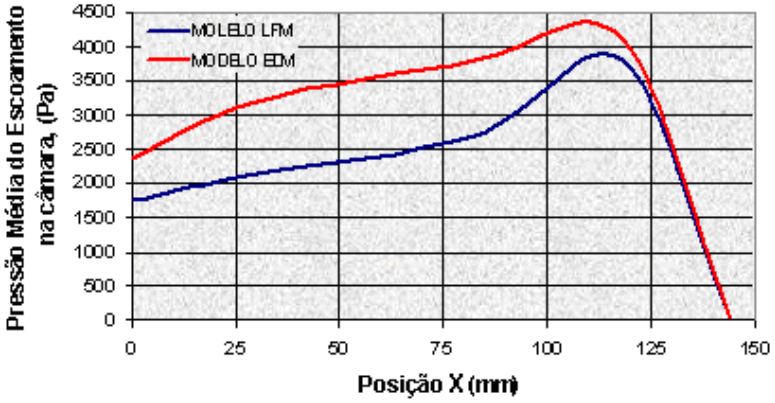


Figura 5. 27 Representação da pressão relativa média característica da câmara funcionando com gás metano

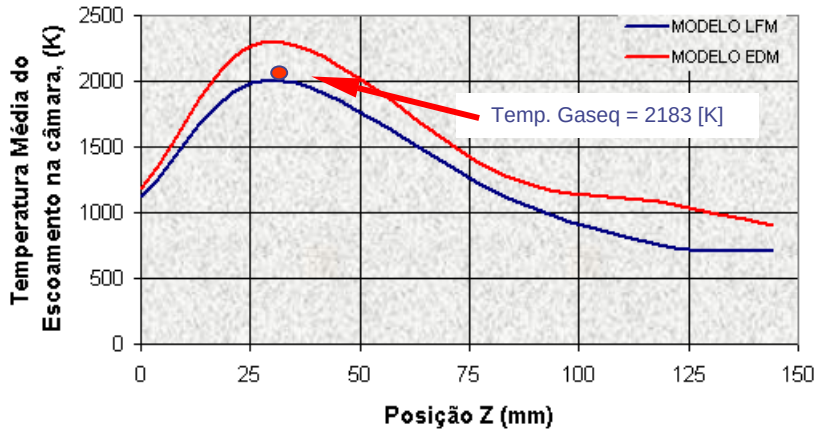


Figura 5. 28 Representação da temperatura total média característica da câmara funcionando com gás metano e do ponto de referência da temperatura da chama adiabática calculada pelo programa Gaseq v. 7.2

Das Figuras 5.26 a 5.28, verifica-se que o modelo de combustão EDM tende a sobre-valorizar as velocidades, pressões e temperaturas obtidas numericamente. Esta tendência se justifica pelo fato de que esta aproximação matemática foi concebida para chamas completamente pré-misturadas. No modelo testado, combustível e oxidante podem se misturar fora ou dentro da zona de combustão, caracterizando a formação de uma chama do tipo não pré-misturada ou fracamente pré-misturada.

5.3.2 Resultados para o Modelo de Combustão FM utilizando Gás Natural

As Figuras de 5.29 a 5.31 apresentam os campos de pressão média relativa, velocidade média e temperatura média projetados sobre um plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama.

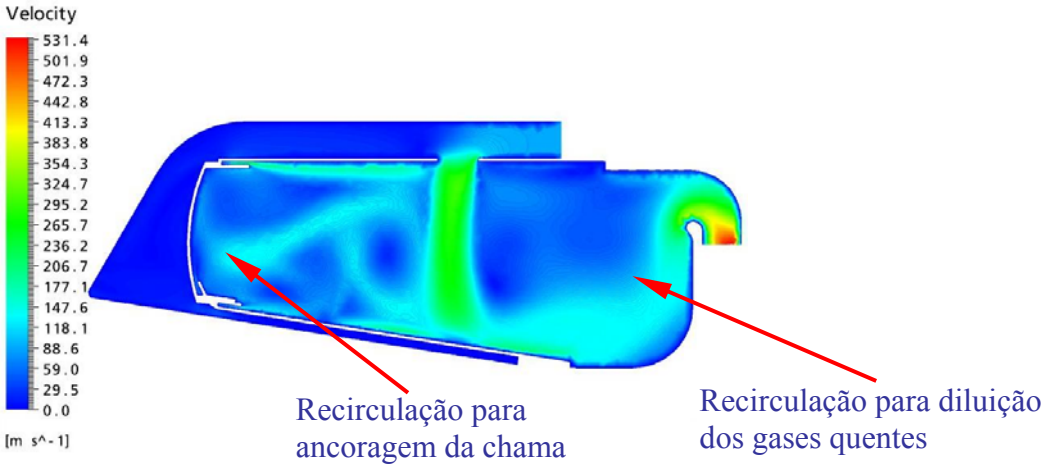


Figura 5. 29 Campo de velocidade média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

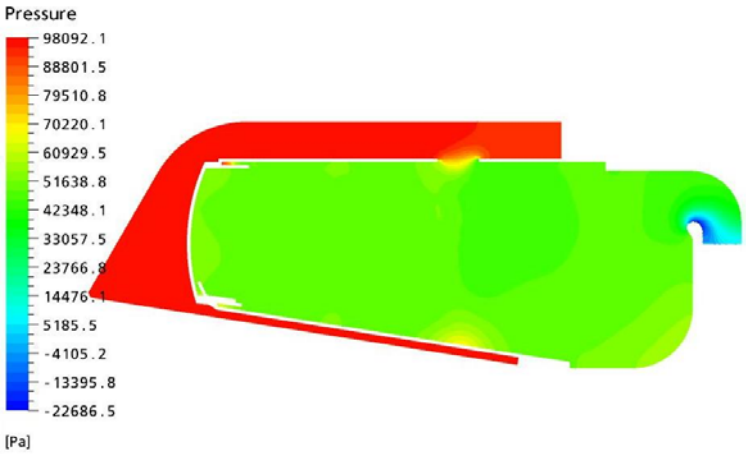


Figura 5. 30 Campo de pressão média relativa num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

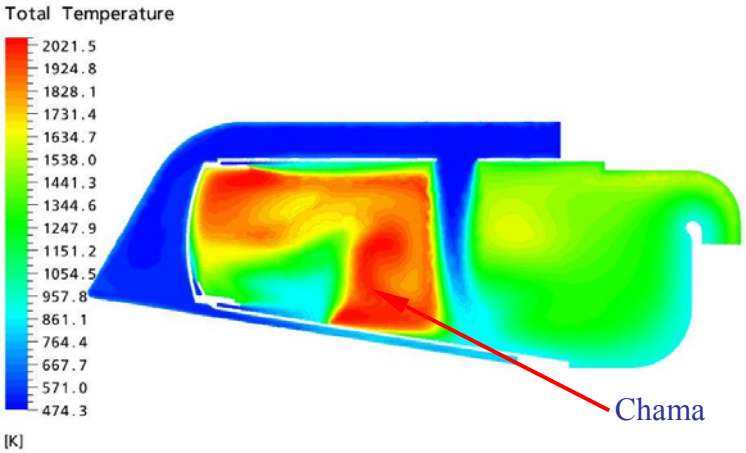


Figura 5. 31 Campo de temperatura total média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

Na Figura 5.32, mostra-se as velocidades média sobre três planos transversais no tubo de chama, localizados nas posições de referência **x/L = 0,20**, **x/L = 0,40** e **x/L = 0,70**.

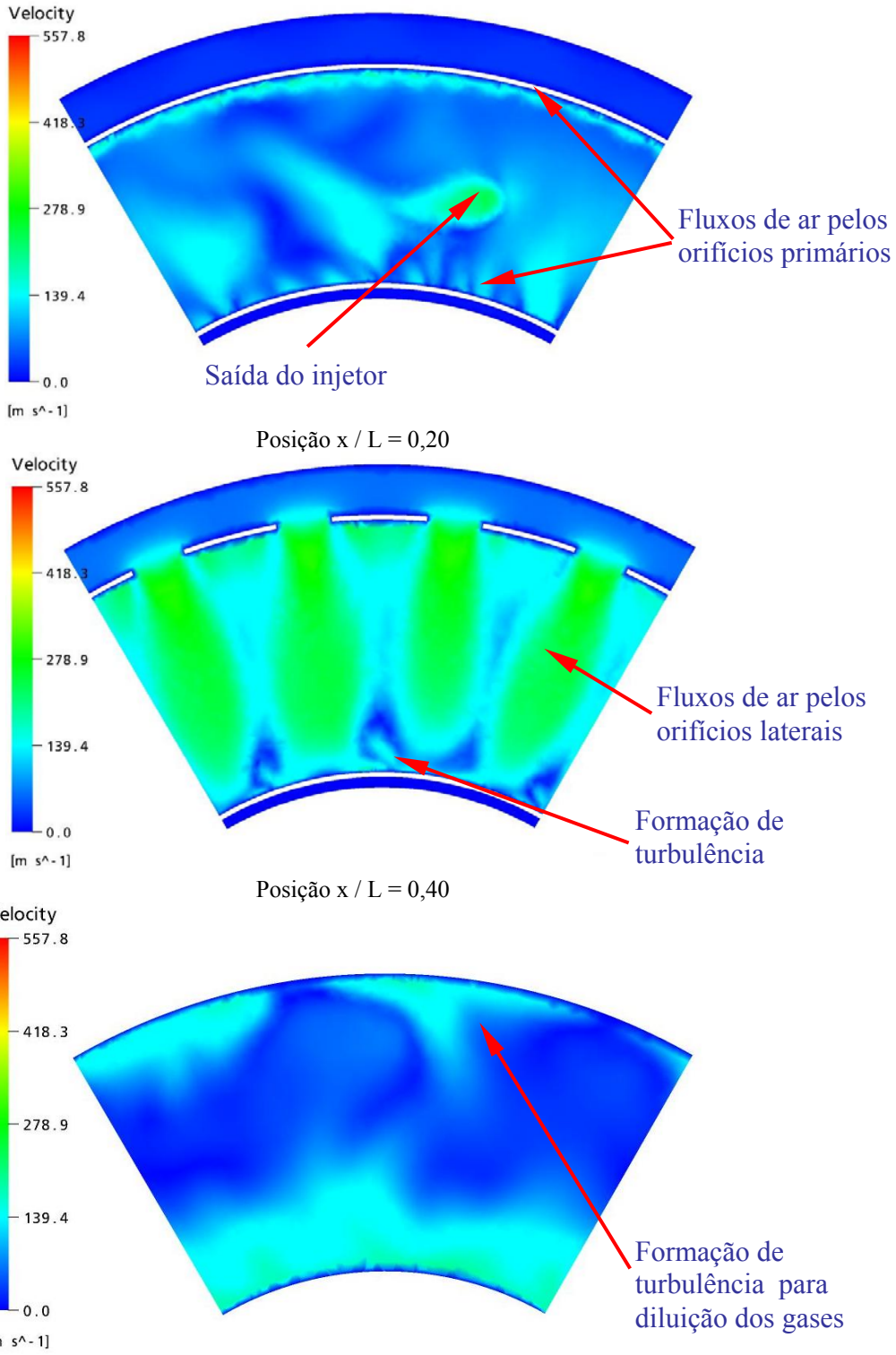


Figura 5. 32 Campo de velocidade média em três planos transversais localizados nas posições x/L = 0,20, x/L = 0,40 e x/L = 0,70 no tubo de chama

Na Figura 5.33, apresenta-se a projeção da Temperatura Total Média na exaustão da câmara de combustão, indificando zonas de alta temperatura.

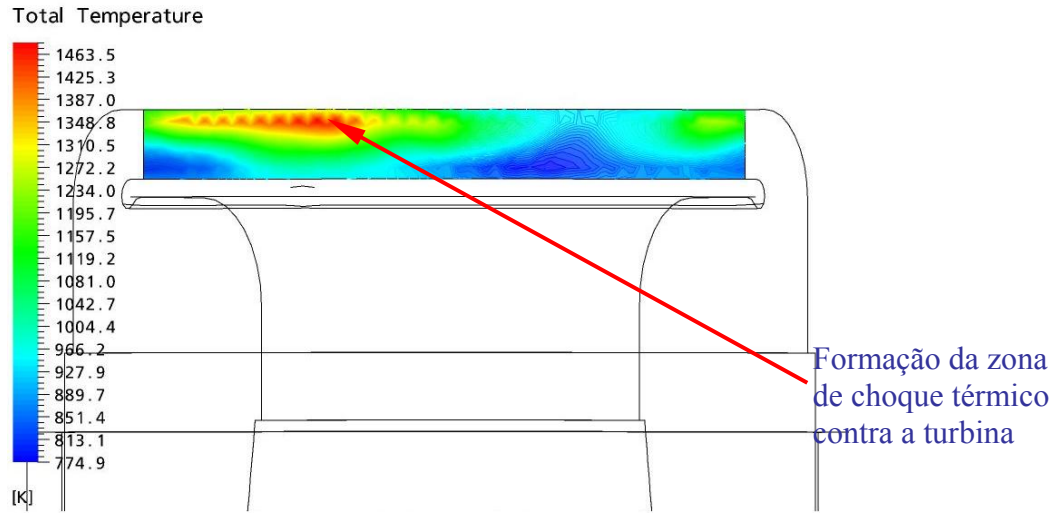


Figura 5. 33 Campo de temperatura total média na exaustão do tubo de chama

Considerando a posição do plano longitudinal indicado pelas Figuras 5.29 a 5.31, a Tabela 5.4 apresenta as distribuições da velocidade média, pressão média relativa total e temperatura média ao longo de um eixo **Z** a partir do injetor, considerando os pontos de referência definidos pela Figura 5.18.

Tabela 5. 4 Resultados obtidos para o modelo de combustão FM

PONTO	Posição em relação ao injetor	Velocidade média do escoamento	Pressão relativa média do gás	Temperatura do gás
I	X	VGÀS	PGÁS	TGÀS
1	m	m/s	Pa	K
1	0	62,4147	48835,4	1634,11
2	0,00795	57,3267	48297,8	1882,3
3	0,016	61,9754	48147,8	1870,58
4	0,0254	85,4507	48198,1	1848,24
5	0,03335	106,532	48065,9	1749,42
6	0,0413	104,231	47872,3	1635,54
7	0,04925	90,6866	47370	1730,09
8	0,0572	65,0966	46954,2	1941,99
9	0,06515	82,1673	47269,7	1889,18
10	0,0731	218,148	48374,5	1277,73
11	0,0771	280,41	46886,4	538,561
12	0,08105	226,575	45276,9	697,697
13	0,089	44,0114	44261,7	1519,52
14	0,09695	40,2657	44364,2	1567,79
15	0,1049	46,8201	44812,4	1520,55
16	0,11285	40,7502	45276,5	1450,68
17	0,1208	38,6219	45627	1403,55
18	0,12875	44,5291	45736,8	1364,3
19	0,1367	81,8911	45383,7	1287,17
20	0,14465	220,465	41710,8	1138,68
21	0,159	423,012	10365,6	1122.96

Para o modelo de cobustão FM, a temperatura máxima da chama e a temperatura média total dos gases quentes na exaustão são 2021 [K] e 1017 [K], respectivamente.

Comparando estes valores de temperatura 2021 [K] e 1017 [K] com os dados de projeto do modelo da câmara de combustão do tipo anular testada, fornecidos pelo catalogo do fabricante (ver Tabela 4.1), bem como com a temperatura adiabática da chama calculada pelo GASEQ v. 7.2, cujo valor é 2183 [K], nota-se que os valores obtidos estão próximos.

5.3.3 Resultados para o Modelo de Combustão EDM utilizando Gás Natural

Em analogia ao realizado no item 5.3.2, as Figuras de 5.33 a 5.35 apresentam os campos de pressão média relativa, velocidade média e temperatura média projetados sobre um plano longitudinal.

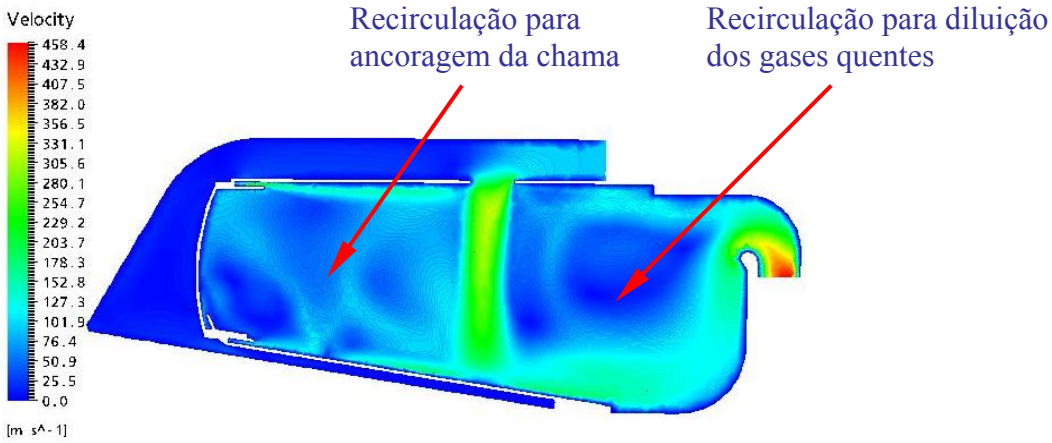


Figura 5. 34 Campo de velocidade média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

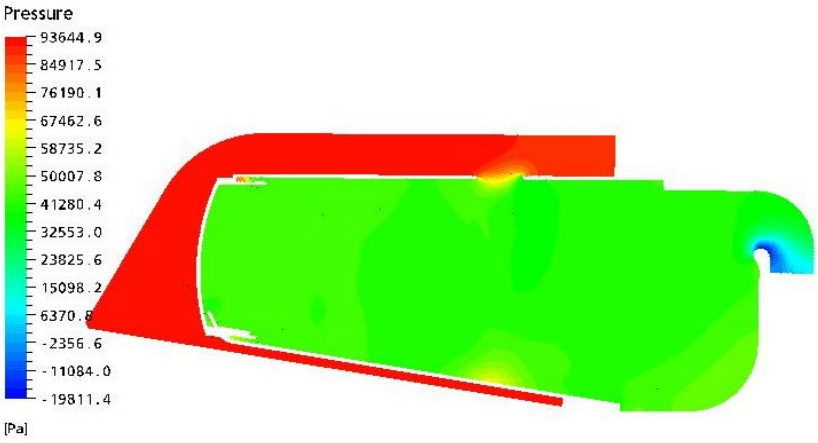


Figura 5. 35 Campo de pressão média relativa num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

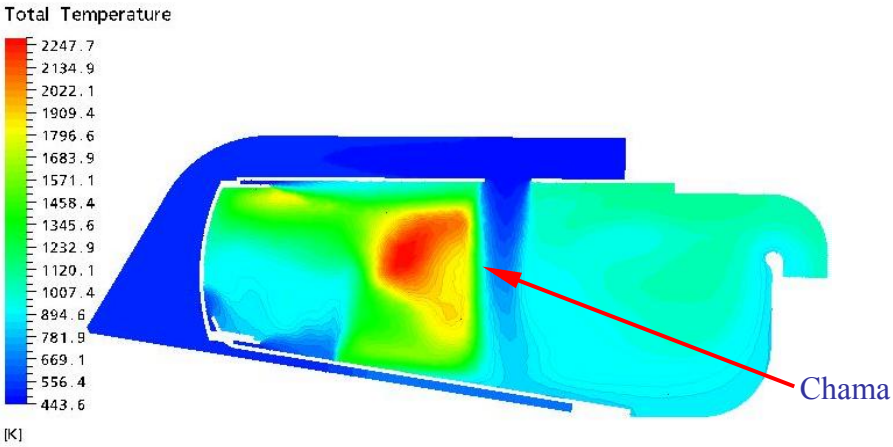


Figura 5. 36 Campo de temperatura total média num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

Nas Figura 5.37 e 5.38, mostra-se as velocidades média sobre três planos transversais no tubo de chama, localizados nas posições de referência x/L = 0,20, x/L = 0,40 e x/L = 0,70.

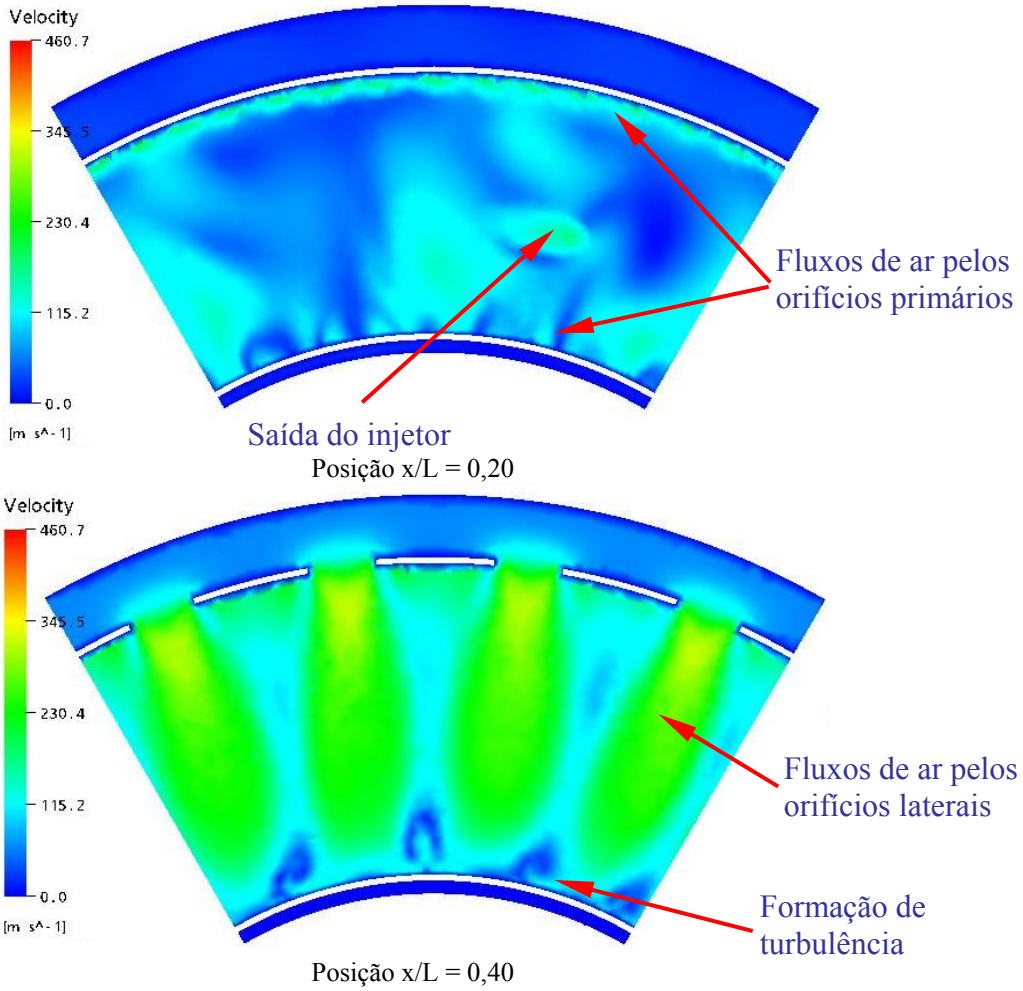
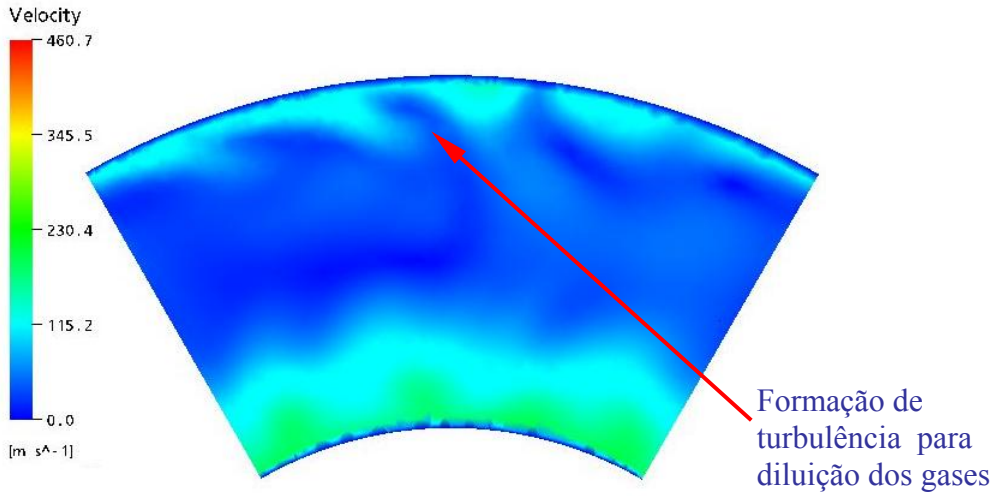


Figura 5. 37 Campo de temperatura total média em dois planos transversais localizados nas posições x/L = 0,20 e x/L = 0,40 no tubo de chama



Posição x/L = 0,70

Figura 5. 38 Campo de temperatura total média em dois planos transversais localizados nas posição x/L = 0,70 no tubo de chama

Na Figura 5.39, apresenta-se a projeção da Temperatura Total Média na exaustão da câmara de combustão, indificando zonas de alta temperatura.

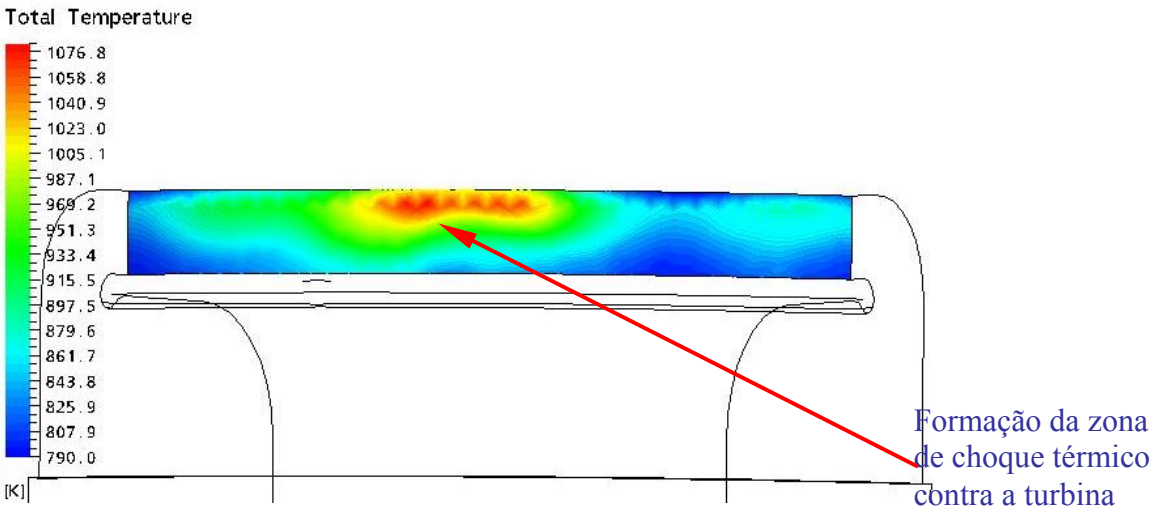


Figura 5. 39 Campo de temperatura total média na exaustão do tubo de chama

Na Tabela 5.5, são apresentados os valores de velocidade, pressão e temperatura obtidos sobre os pontos de referência para o eixo **Z** a partir do injetor (ver Figura 5.18).

Tabela 5. 5 Resultados obtidos para o modelo de combustão EDM

PONTO	Posição em relação ao injetor	Velocidade média do escoamento	Pressão relativa média do gás	Temperatura do gás
I	X	VGÀS	PGÁS	TGÀS
1	m	m/s	Pa	K
1	0	61,2	42508,3	1030,3
2	0,00795	50,2	41873	969,8
3	0,016	62,1	41825,3	1036,5
4	0,0254	40,9	41841,8	1131
5	0,03335	43,5	41723,6	1200,4
6	0,0413	62,8	41339,6	1539,9
7	0,04925	50,9	40679,1	2208,90
8	0,0572	59,5	40695,5	2188,3
9	0,06515	69,1	40904,7	1949,3
10	0,0731	195,3	41148,4	964,9
11	0,0771	293,7	40809,3	609,3
12	0,08105	221,3	39107,3	642,8
13	0,089	37,8	37597,3	1010,5
14	0,09695	60,7	38965,8	1022,5
15	0,1049	31,3	39588,3	1022,9
16	0,11285	34,6	39635,4	1039,7
17	0,1208	32,3	39734,3	1062
18	0,12875	20,3	40032,7	1092,5
19	0,1367	55,7	40303,3	1090,9
20	0,14465	190,6	37288,7	1005,7
21	0,159	384,2	7813,6	982,9

Para o modelo de cobustão EDM, a temperatura máxima da chama e a temperatura média total dos gases quentes na exaustão são 2486 [K] e 833 [K], respectivamente.

Comparando estes valores de temperatura 2486 [K] e 833 [K] com os dados de projeto do modelo da câmara de combustão do tipo anular testada, fornecidos pelo catalogo do fabricante (ver Tabela 4.1), bem como com a temperatura estimada pelo GASEQ sob condições adiabáticas, cujo valor é 2183 [K], nota-se que os valores obtidos numericamente estão dispersos.

5.3.4 Comparação entre os Modelos de Combustão Testados utilizando Gás Natural

A partir dos dados fornecidos pelas Tabelas 5.4 e 5.5, pode-se determinar as curvas características da câmara de combustão para ambos os modelos de combustão, de forma representativa, como é mostrado pelas Figuras 5.40 a 5.42 com relação ao plano longitudinal de referência (ver Figura 5.18), sendo **x** a posição relativa à superfície adjacente a entrada do injetor no tubo de chama, cujo comprimento longitudinal máximo **L** no eixo **X** é igual a 159 [mm].

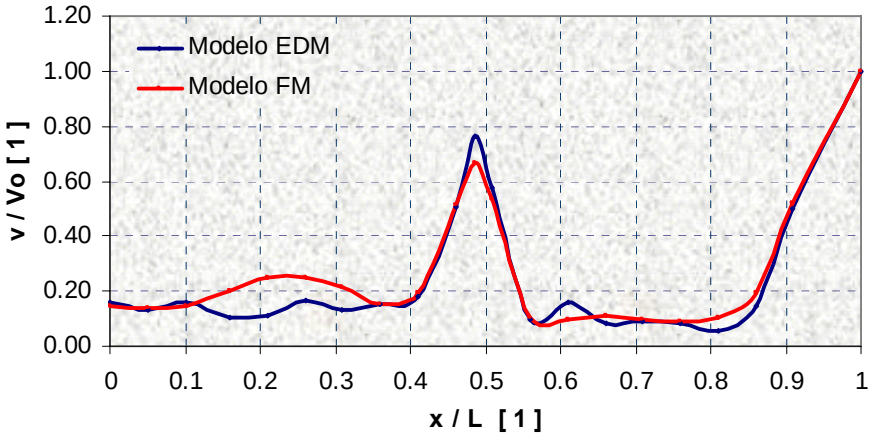


Figura 5. 40 Representação da velocidade média adimensional ao longo do plano longitudinal na câmara, em relação às velocidades máximas Vo obtidas pelos modelos de combustão FM e EDM nos pontos de referência, respectivamente, 423 [m/s] e 384 [m/s]

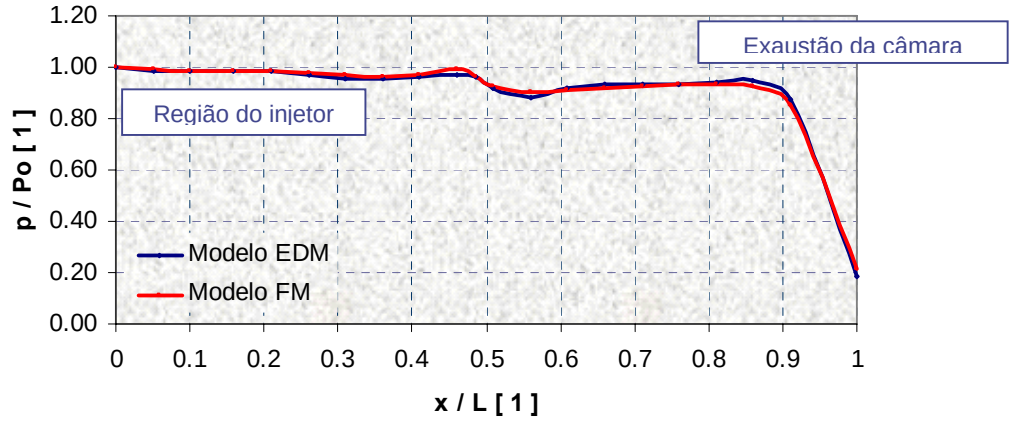


Figura 5. 41 Representação da pressão característica: pressão média relativa adimensional ao longo do plano longitudinal na câmara, em relação às pressões máximas Po obtidas pelos modelos de combustão FM e EDM nos pontos de referência, respectivamente, 48835 [Pa] e 42508 [Pa]

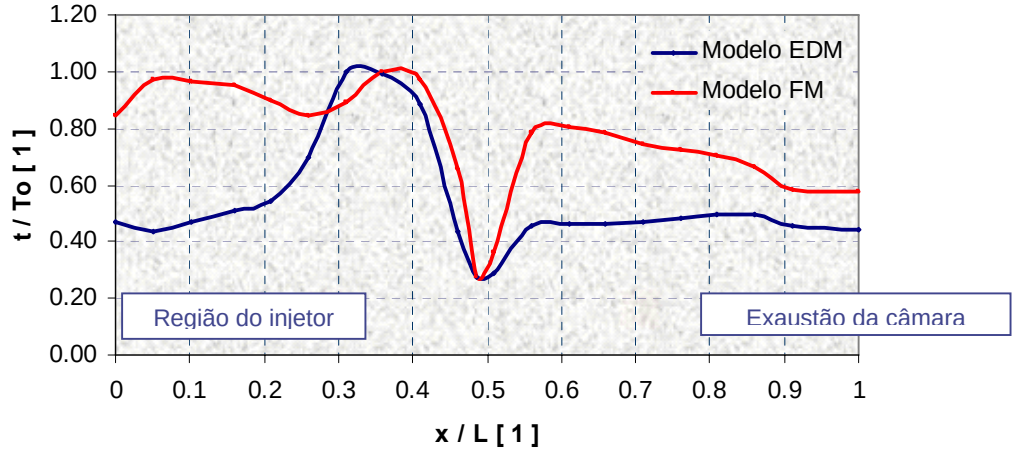


Figura 5. 42 Representação da temperatura total média característica ao longo do plano longitudinal na câmara, em relação às temperaturas To da chama obtidas pelos modelos de combustão FM e EDM nos pontos de referência, respectivamente, 1942 [K] e 2209 [K]

Nota-se das Figuras 5.40 e 5.42, que o aumento significativo da velocidade média e a diminuição significativa da temperatura média entre as posições **x / L = 0,40** e **x / L = 0,60** decorre do fluxo do ar advindo dos orifícios laterais do chama, para ambos modelos de combustão FM e EDM. Os demais valores obtidos para a velocidade média e pressão total relativa média praticamente são coincidentes para os pontos **x / L < 0,40** e **x / L > 0,60**.

Das Figuras 5.32, 5.33, 5.37, 5.38 e 5.39, nota-se que:

a) os fluxos de ar advindos dos orifícios primários provocam o resfriamento do tubo de chama ao redor da zona de combustão, na saída do injetor;

b) os fluxos de ar dos orifícios laterais do tubo de chama apresentam penetrabilidade total sobre a seção transversal radial da câmara, formando zonas de turbulência na superfície lateral radial inferior do tubo de chama, contribuindo desta forma para a ancoragem da chama;

c) nas proximidades da exaustão, existe formação de turbulência que contribui para a diluição dos gases quentes, somado ao efeito existente de um escoamento secundário rotativo ao redor do eixo principal da camara; e

d) na exaustão, existe formação de uma zona de alta temperatura, que pode provocar danos irrerversíveis às pás da turbina.

De maneira geral para ambos os modelos de combustão, verifica-se também que:

a) A zona de combustão, que é formada entre o injetor e o fluxo de ar advindo dos orifícios laterais do tubo de chama, apresenta intensa flutuação nos valores da temperatura, devido à turbulência decorrente do movimento rotativo do gás quente nas proximidades do injetor;

b) Significativa aproximação da frente de chama em relação às paredes laterais do tubo de chama, que indica a necessidade para a modificação do projeto da câmara, visando evitar este fenômeno. O modelo FM mostra isto com maior representatividade do que o modelo EDM, como é mostrado pelas Figuras 5.31 e 5.36; e

c) O posicionamento das regiões de maiores temperaturas na exaustão são praticamente coincidentes, como mostram as Figuras 5.33 e 5.39.

A partir destas analises, somando aos resultados obtidos no processo de validação termo-aerodinâmica no item 5.1, o modelo de combustão mais apropriado para caracterizar o comportamento da chama na câmara de combustão testada, utilizando gás natural, é o FM, apesar da baixa convergência (600 iterações com erro alvo de 10^{-4}, com cálculo sem processamento paralelo).

Desta forma, a analise termo-aerodinâmica na câmara testada pode ser conduzida para o levantamento dos vetores velocidade média e para o detalhamento do comportamento da frente de chama em relação às paredes laterais.

A Figura 5.43 mostra a distribuição do vetor velocidade média sobre o plano longitudinal definido pela Figura 5.18, enquanto a Figura 5.44 apresenta a linha de corrente formada.

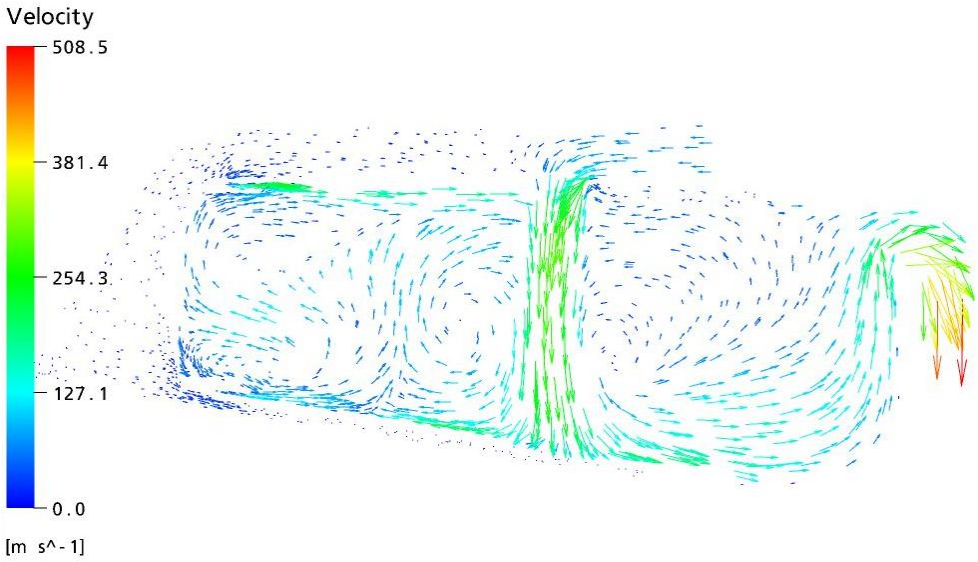


Figura 5. 43 Distribuição do vetor velocidade num plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

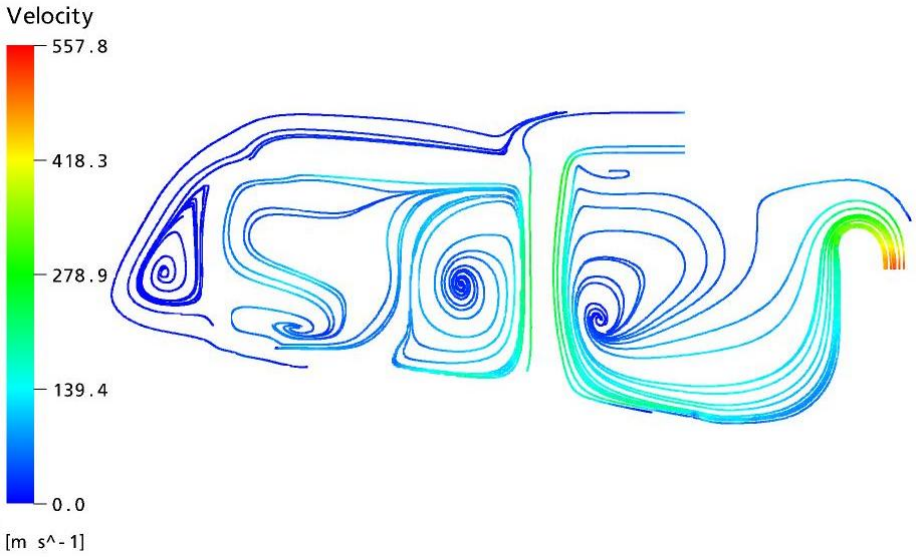


Figura 5. 44 Linhas de corrente formadas no interior da câmara de combustão projetadas sobre um plano longitudinal passante por um dos orifícios laterais do tubo de chama

Nota-se da Figura 5.43, que os vetores velocidades denotam mais de uma recirculação presente no interior do tubo de chama, o que é confirmado pela Figura 5.44 as quais podem afetar a dinâmica da mistura entre combustível e oxidante.

Outra característica que pode ser identificada é a mudança no comportamento da recirculação num escoamento a frio (ver Figura 5.16) e num escoamento à quente (Figura 5.43), que pode ser um indicativo sobre a mudança na densidade da mistura resultante.

As Figuras 5.45 e 5.46 mostram as temperaturas na superfície da câmara de combustão obtidas para o modelo de combustão FM, que pode servir como referencia para ensaios experimentais do modelo, utilizando gás natural como fluido de trabalho.

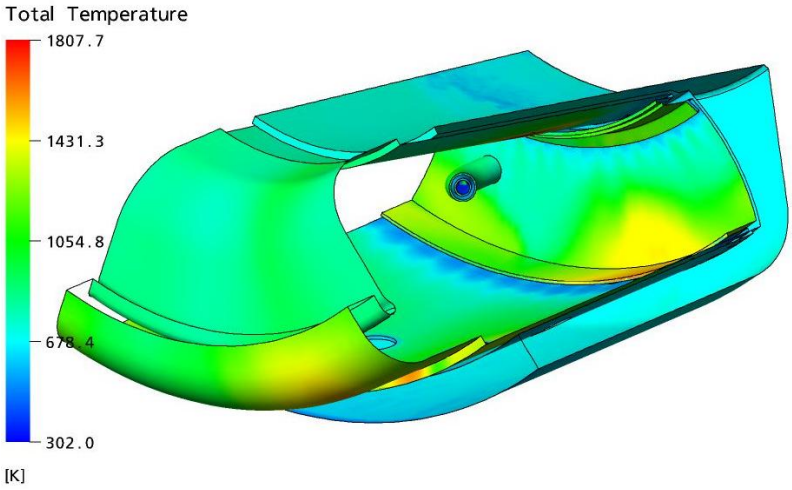


Figura 5. 45 Distribuição de temperatura na superfície da câmara de combustão usando metano e o modelo de combustão FM

Da Figura 5.45, pode-se verificar a formação de uma intensa recirculação numa direção perpendicular ã superfície interna do tubo de chama, posição radial inferior nas proximidades do injetor, pois existe uma alta gradiente de temperatura nesta região, como é demonstrado pela Figura 5.46.

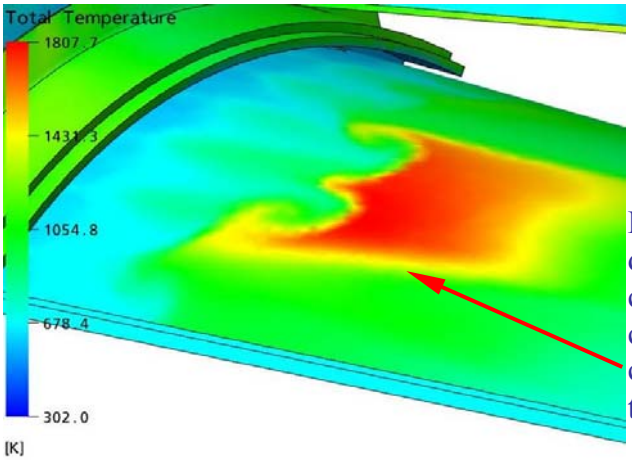


Figura 5. 46 Formação de intenso gradiente de temperatura na superfície interna do tubo de chama, posição radial inferior nas proximidades do injetor

A Figura 5.46 denota que uma frente de chama se aproxima da parede do tubo do chama, apresentando a formação de turbulência e temperaturas superiores a 1800 [K]. É uma região de choque térmico. Isto reforça a necessidade de mudanças no projeto geométrico da câmara de combustão testada ao operar com gás natural, a fim de evitar este efeito que compromete a vida útil do equipamento.

Utilizando o modelo FM, a perda de pressão média total (perda de carga) na câmara de combustão é de, aproximadamente, 94,6 [kPa].

5.4 Propostas para Adequação do Projeto da Câmara de Combustão Testada para Gás Natural

Baseando-se na modelagem implementada por este trabalho sobre uma câmara de combustão da micro turbina a gás da Solar turbines, operando com gás natural, é possível propor melhorias no projeto original, visando atender diferentes condições de operação e evitar o comprometimento da vida útil do equipamento. .

Como proposta de desenvolvimento tecnológico, podem se destacar:

- Modificar a área da seção transversal na saída do ar a partir do injetor de combustível. Neste caso, o aumento desta seção pode contribuir em diminuir a velocidade resultante da chama, fazendo-a aproximar-se da saída do injetor, mantidos a vazão mássica de ar e combustível, e demais dimensões da câmara;
- Diminuir a seção de abertura dos orifícios localizados nas posições radiais interna e externa do tubo de chama, a fim de aumentar a velocidade do ar e gerar uma película de ar para resfriamento das paredes laterais, sob o efeito da Camada Limite;
- Aumentar a seção de abertura dos orifícios laterais do tubo de chama a fim de diminuir a velocidade do jato de ar utilizado para diluição dos gases quentes, resfriamento das paredes e ancoragem da chama;
- Aumentar o volume da câmara com relação à seção transversal radial para afastar as paredes laterais da frente de chama;
- Reposicionar os orifícios laterais do tubo de chama numa distância maior da saída dos injetores, a fim de ancorar a chama numa posição um pouco mais afastada, diminuindo o efeito da turbulência sobre a mesma; e
- Diminuir a quantidade de orifícios laterais do tubo de chama. Neste caso, uma maior quantidade de ar pode ser direcionada para os injetores. A fim de evitar

mudança na razão ar / combustível, a solução de aumentar a seção da abertura de ar no injetor é aceitável. Este caso é complexo porque a chama poderia ficar um pouco mais afastada dos injetores e comprometer a eficiência da combustão; e

- Aumentar a quantidade de injetores de combustível, desde que suas dimensões diminuam. Neste caso, a vazão mássica da mistura ignitável permanece constante, porém aumenta a intensidade do escoamento secundário rotativo em torno do eixo principal do tubo de chama, induzindo um maior tempo de residência e uma deformação no volume da chama. Esta deformação pode ser caracterizada pela diminuição do alcance radial e pelo aumento do alcance longitudinal da chama. Este caso é complexo, devido à mesma razão assinalada na solução anterior.

Desta forma, após expor no presente capítulo os processos de validação da Dinâmica de Fluidos Computacional aplicada em um modelo de câmara de combustão, bem como a análise do seu comportamento, tanto aerodinâmico, quanto térmico utilizando gás metano e gás natural, que contribuíram para a elaboração de diversos artigos para congressos e periódicos internacionais, bem como a proposição de soluções técnicas para a adequação da câmra de combustão projetada para operar inicialmente com diesel e/ou querosene, o próximo capítulo apresenta as principais conclusões e recomendações para futuros trabalhos.

Capítulo 6

CONCLUSÕES, CONTRIBUIÇÕES E RECOMENDAÇÕES

Após a realização dos cálculos de Dinâmica de Fluidos Computacional num modelo de câmara de combustão da micro turbina a gás T.62T-32 da Solar Turbines para veririfcar os efeitos da mudança do tipo de combustível no comportamento termo-aerodinâmico da chama no capítulo 5, bem como a realização da validação dos modelos matemáticos para simular o escoamento turbulento e a combustão propostos no capítulo 4, este capítulo apresenta as principais conclusões deste trabalho, ressaltando as contribuições para a pesquisa cientifica e as recomendações para futuros trabalhos.

6.1 Conclusões

A análise dtermo-aerodinâmica conduzida no capítulo 5 sobre o modelo de câmara de combustão do tipo anular operando com combustíveis alternativos (gás metano e gás natural), permite elaborar as seguintes conclusões:

1º. A validação aerodinâmica dos modelos identifica que o modelo SST pode ser considerado o mais representativo para a simulação do escoamento na câmara de combustão decorrente da sua precisão;

2° A validação termo aerodinâmica dos modelos de combustão identifica que o modelo FM pode ser considerado o mais representativo para a simulação da combustão decorrente da sua precisão;

3° A analise aerodinâmica feita pelo modelo de escoamento turbulento SST indica a formação de zonas de recirculação interna no tubo de chama, que pode afetar o tempo de residência da chama;

4° A análise termo aerodinâmica feita pelo modelo de combustão FM indica a formação de chama dispersa para o gás metano e para o gás natural, típico para chamas não pré-misturadas, apesar da baixa convergência (600 iterações e erro alvo de 10^{-4} , com cálculos sem processamento paralelo);.

5° As flutuações de temperatura no interior do tubo de chama indicam que o EDM não pode ser aplicado, porque abrange menores temperaturas, típicas para chamas pré-misturadas, apesar da baixa convergência; e

6° Os estudos realizados indicam que o projeto deve ser modificado a fim de adequar a câmara de combustão anular dos estudos de casos para operar com gás metano ou gás natural.

6.2 Contribuições

A partir da simulação do comportamento da chama em um modelo de câmara de combustão testada, este trabalho apresenta as seguintes contribuições:

1º. Desenvolveu-se uma metodologia para o estudo termo-aerodinâmico tridimensional de câmaras de combustão para operar com diferentes combustíveis em regime permanente;

2° Definição dos fatores internos que podem caracterizar o comportamento das câmaras de combustão através de dados numéricos que são impraticáveis em testes experimentais;

3° Definiu-se propostas para a adequação da câmara para operar com combustíveis alternativos (gás natural) em relação aos combustíveis adotados pelo fabricante. As potenciais adequações do projeto original contemplam, principalmente, a quantidade, a disposição espacial e a geometria dos bicos injetores, bem como dos orifícios laterais do tubo de chama; e

4° Verificou-se que o CFD pode ser considerado uma ferramenta computacional promissora para o estudo de câmaras de combustão.

6.3 Recomendações

Com base nos resultados obtidos por este trabalho, pode-se sugerir os seguintes trabalhos futuros:

1° Simulação em CFD do comportamento de câmaras de combustão, utilizando gás de gaseificação da biomassa, verificando potenciais modificações no projeto;

2° Desenvolvimento de uma metodologia para aplicação de diferentes modelos de emissões para caracterizar a temperatura e as emissões na exaustão, utilizando gás natural e/ou gás de gaseificação da biomassa;

3° Investigação do comportamento da câmara de combustão sob condições de carga parcial em regime permanente;

4° Análise do transiente aero – termodinâmico de câmaras de combustão anular, operando com gás natural e/ou gás de gaseificação da biomassa; e

5° Estudo termo acústico da câmara de combustão, utilizando gás natural e /ou gás da gaseificação da biomassa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABREU P. L., MARTINEZ J. A., (**1999)**, "Natural Gas: Fuel for the New Millennium", Plural Communication, Porto Alegre, RS, Brazil.

ALLEN J. W (**1998**), "Low Nox Burner Designs", *Proceedings of the American Power Conference*, Vol. 60 – II, pp. 869 – 874.

ANTONIO A. S., FERNANDO J. R., ILDO L. S., MOUTINHO E. S. (**2003**), "Micro-Geração: Tecnologia, Desafios e Oportunidades", *2° Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás*, USP, São Paulo.

APPLEBY A. J. (**1995**), "Electrochemical Energy — Progress Towards A Cleaner Future: Lead/Acid Batteries And The Competition", *Journal of Power Sources*, Volume 53, Issue 2, February 1995, pp. 187-197.

ARIOLI G., KOCH H. (**2003**), "The Bifurcation Graph of Kuramoto-Sivashinski Equation", *Third International Workshop on Taylor Methods and Proceedings*, Miami, USA. P. 15.

BARDINA J. E., HUANG P.G., COAKLEY T. J., (**1997**), "Turbulence Modeling Validation Testing and Development", NASA Technical Memorandum n° 110446.

BARTH T., OHLBERGER M. (**2004**), "Finite Volume Methods: Foundation And Analysis", *Encyclopedia of Computational Mechanics*, John Wiley & Sons Ltd.

BEER J.M., FOSTER P. J., **SIDDALL R.G**. (**1971**), "Calculation Methods of Radiative Heat Transfer", *HTFS Design Report No. 22*, AEA Technology (Commercial).

BICEN A. F., TSE D., WHITELAW J. H. (**1988**), "Flow and Combustion Characteristics of an Annular Combustor", *Combustion and Flame*, Volume 72, Issue 2, pp. 175-192.

BOLZ R.E., **TUVE G. L** (**1970**), "Handbook of Tables for Applied Engineering Science", *Chemical Journal*, New York.

BORBELY, ANN-MARIE, KREIDER, JAN F. (**2001**), "Distributed Generation", *CRC Press*.,Washington D. C., USA.

BOVE R., **LUNGHI P**. (**2006**), "Electric Power Generation From Landfill Gas Using Traditional And Innovative Technologies", *Energy Conversion and Management*, Volume 47, Issues 11-12, pp. 1391-1401.

BREIKIN T.V., HERBERT I.D., KIM S.K., REGUNATH S., HARGRAVE S.M., THOMPSON H.A., **FLEMING P. J.** (**2006**), "Staged Combustion Control Design for Aero Engines", *Control Engineering Practice*, Volume 14, Issue 4, pp. 387-396.

CAPSTONE (**2000**), "Experimental Tests and Behaviour in Capstone Gas Turbines", http://www.capstoneturbine.com.

CHIGIER N. A., **BERR J. M.** (**1983**), "Combustion Aerodynamics", *Robert E. Krieger Publishing Company*, Malabar, Florida, USA.

CICCARELLI G., JACKSON D., VERREAULT J. (**2006**), "Flammability Limits of NH_3–H_2–N_2–Air Mixtures at Elevated Initial Temperatures", *Combustion and Flame Journal*, Volume 144, Issues 1-2, pp. 53-63.

CLARKE D. S., **WILKERS N. S**. (**1989**), "The Calculation of Turbulent Flows in Complex Geometries using a Differential Stress Model", AERE-R13428.

COHEN H., ***et al***. (**1987**), "Gas Turbine Theory", 3ª Edition, *Longman Scientific & Technical,* New York, USA.

COZZI F., **COGHE A.** (**2006**), "Behavior of Hydrogen-Enriched Non-Premixed Swirled Naturas Gás Turbines", *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 3, Issue 6, pp. 669-677.

CRISTINA M. C., **TUCCILO R.** (**2004**), "Comparing Different Solutions For The Micro-Gas Turbine Combustor", *Proceedings of ASME Turbo Expo*, Power for Land, Sea and Air, June 14-17, Vienna, Austria, GT 2004-53286.

DAVIDSON L. (**2003**), "An Introduction to Turbulence Models", Publication n° 97/2, *Department of Thermo and Fluid Dynamics*, Chalmers University of Technology, Goteborg, Suécia, 48 p, http://www.tfd.chalmers.se/˜lada.

DUPONT V., WILLIAMS A. (**1998**), "NOx Mechanisms in Rich Methane-Air Flames", *Combustion and Flame*, Volume 114, Issues 1-2, pp. 103-118.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (**1993**), "Alternative Control – Technical Documents – NOx Emissions from Stationary Gas Turbines, Emission Standards", Carolina do Norte, USA, p. 399.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (**2002**), "Technology Characterization: Microturbines", *Energy Nexus Group*, Arlington Virginia, USA, p. 24.

FENIMORE C. P., DRAKE M. C., CORREA S. M., PITZ R. W. (**1987**), "Superequilibrium And Thermal Nitric Oxide Formation In Turbulent Diffusion Flames", *Combustion and Flame*, Volume 69, Issue 3, pp. 347-365.

FERZIGER J. **H., PERIC M**., (**1999**), "Computational Methods for Fluid Dynamics", 3rd Edition, Springer-Verlag Press, ISBN 3-540-42074-6, New York, USA, p. 423.

FOX R. W., MCDONALD A. T. (**1988**), "Introdução a Mecânica dos Fluidos", Guanabara Koogan Editora, 3ª. Edição, Editora Guuanabara Koogan, ISBN 85-277-0064-6, Rio de Janeiro, Brasil, p. 632.

FULLER E. J., **SMITH C. E.** (**1994**), "CFD Analysis of a Research Gas Turbine Combustor Primary Zone", AIAA-94-2768, *30th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Indianópolis, IN, USA.

GHONEIM A. A. (**2006**), "Design Optimization Of Photovoltaic Powered Water Pumping Systems", *Energy Conversion and Management*, Volume 47, Issues 11-12, pp.1449-1463.

GOSSELIN P., DECHAMPLAN A., KALLA S., KRETSCHMER D. (**2000**), "Three Dimensional CFD Analysis of a Gás Turbine Combustor", AIAA 2000-3466, *36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Huntsville, Alabama, USA.

GURGEL C. A., **MADELA V. Z**. (**2000**), "Modeling of a Microturbine Combustion Chamber with the CHEMKIN III Package", *American Flame Research Committee (AFRC) International Symposium*, Newport Beach, CA, USA.

GURGEL C. A., ALVES F. S., OLAVO M. M. C. (**2002**), "Projeto e Estudo de Desempenho da Câmara de Combustão de uma Microturbina", *IX Congresso Brasileiro*

de Engenharia e Ciências Térmicas -- 9th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Paper CIT02-0391, Itajubá, MG.

HAMER A. J., ROBY R. J. (**1997**), "CFD Modeling of a Gás Turbine Combustor using Reduced Chemical Kinetic Mechanisms", AIAA 1997-3242, *33rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Seattle, WA, USA.

HANDBOOK OF CHEMISTRY AND PHYSICS (**2005**), "Physical Properties for Fuels", 85th Edition, *The Chemical Rubber Company Press*, National Institute of Standards and Technology Oklahoma, USA.

HIRSCH C. (**1990**), "Numerical Computation of internal and External Flows", Vol. 2, Wiley

HOTTEL H.C., SAROFIM A.F. (**1967**), "Radiative Transfer", McGraw-Hill, New York, USA.

ILBAS M., CRAYFORD A.P., YILMAZ İ., BOWEN P. J., SYRED N. (**2006**), "Laminar-Burning Velocities of Hydrogen–Air and Hydrogen–Methane–Air Mixtures: an Experimental Study", *International Journal of Hydrogen Energy*.

ISRAEL INSTITUTE OF TECHNOLOGY (**2003**), "FLOXCOM – Low NOx Flameless Oxidation Combustor for High Efficiency Gas Turbines", Project n° NNES-1999-20246, Israel, p. 156.

JIANG L. Y., CAMPELL I. (**2004**), "A Critical Evaluation Of Nox Modeling In A Model Combustor", *Proceedings of ASME Turbo Expo*, Power for Land, Sea and Air, June 14-17, Vienna, Austria, GT 2004-53641.

KOUTSENKO I. G., ONEGIN S. F., SIPATOV A. M. (**2004**), "Application Of CFD-Based Analysis Technique For Design And Optimization Of Gas Turbine Combustors", *Proceedings of ASME Turbo Expo*, Power for Land, Sea and Air, June 14-17, Vienna, Austria, GT 2004-53398.

KUO K.K. (**1986**), "Principles of Combustion", John Wiley & Sons Edition, New York, EUA.

LAI M. K., REYNOLDS R. S., ARMSTRONG J. (**2002**), "CFD-Based, Parametric, Design Tool For Gas Turbine Combustors From Compressor Deswirl Exit To Turbine Inlet", *Proceedings of ASME Turbo Expo*, Power for Land, Sea and Air, June 03-06, Amsterdam, The Netherlands, GT 2002-30090.

LEE D., YEH C., TSUEI Y., JIAG W., CHUNG Y. (**1990**), "Numerical Simulations of Gas Turbine Combustor Flame", AIAA 90-2305, *26th AIAA/SAE/ASME/ASEE Joint Propulsion Conference*, July 16-18, Orlando, FL, USA.

LEFEBVRE A. H., REID R, (**1966**), "The Influence of Turbulence on The Structure and Propagation of Enclosed Flames", *Combustion and Flame*, Volume 10, Issue 4, pp. 355-366.

LEFEBVRE A. H. (**1983**), "Gas Turbine Combustion", 1ª Edition, Mc-GrawHill Book Company, New York , USA.

LEFEBVRE A. H. (**1995**), "The Role of Fuel Preparation in Low Emission Combustion", *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol 117, pp. 617-654.

LEVY Y., LIAN K. (**2006**), "Flame Diagnostics based on UV Vibrational Raman Spectroscopy", *Optics and Lasers in Engineerging*, Volume 44, Issue 10, pp. 1009-1026.

LINAN, A. (**1961**), "On The Internal Structure of Laminar Diffusion Flames", Technical Note, Instituto Nacional. del Tecnologia Aeronautica, Esteban Terradas, Madrid, Spain.

LOUIS J. J., KOK J. B. W., KLEIN S. A. (**2001**), "Modeling and Measurements of a 16-KW Turbulent Nonadiabatic Syngas Diffusion Flame in a Cooled Cylindrical Combustion Chamber", *Combustion and Flame*, Volume 125, Issues 1-2, pp. 1012-1031.

LYCKAMA N. J. A. , **KOMEN E. M. J., HERMANNS R. T. E., GOEY L. P. H., VAN BEEK M. C.**, **VERHAGE A . J. L.** (**2002**), "CFD Modeling Of Biogas Co firing In A Gas Turbine", *Proceedings of ASME Turbo Expo*, Power for Land, Sea and Air, Amsterdam, The Netherlands, GT 2002-30103, June 03-06.

MELICK T. A., **KERSCH J.** (**1999**), "Burner Modifications for Cost Effective NOx Control", *Proceeding of the APC*, Vol. 61, Issue 1, pp. 478-482.

MORTON K.W., **MAYERS D.F.** (**2005**), "Numerical Solution of Partial Differential Equations, An Introduction", Cambridge University Press.

NBR 14489, (2000), "Motor Diesel: Análise e Determinação dos Gases e do Material Particulado", ABNT.

NICKOLAUS D. A., CROKER D. S., SMITH C. E. (**2002**), "CFD Modeling of a Gas Turbine Combustor from Compressor Exit to Turbine Inlet", *ASME*.

PARENTE J., ANISIMOV G. M. V. V., CROCE G. (**2004**), "Micro Gas Turbine Combustion Chamber Design And CFD Analysis", *Proceedings of ASME Turbo Expo*, Power for Land, Sea and Air, June 14-17, Vienna, Austria, GT 2004-54247

PAVLAS M., STERHLIK P., JAROSLAV O., SIKULA J. (**2005**), "Integrating Renewable Sources of Energy into an Existing Combined Heat and Power System", *Energy Journal*, USA.

PETERS N. (**2000**), "Turbulent Combustion", Cambridge Monographs on Mechanics, Cambridge University Press, ISBN 10- 0521660823, UK., p. 304

POINSOT T., VEYNANTE D. (**2005**), "Theorical and Numerical Combustion", 2ª Edição, Edwards Inc, ISBN 1-930217-10-2, Filadélfia, USA, p. 522.

POULLIKKAS A. (**2006**), "Implementation of Distributed Generation Technologies in Isolated Power Systems", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, USA.

RAITHBY, G.D. (**1991**), "Equations of motion for reacting, particle-laden flows", *Progress Report*, Thermal Science Ltda, EMR.

RAJVANSHI A. K., GOSWAM Y. (**1986**), "Alternative Energy in Agriculture", *Chapter 4 - Biomass Gasification*, Vol. II, Edition D, CRC Press, PHALTAN-415523, Maharashtra, Índia.

RIZK N. K., MONGLIA H. C. (**1991**), "Three dimensional Analysis of Gas Turbine Combustor", *Jounal of Propulsion and Power*, Vol. 7, N° 1

RUTLAND C. J., **RAO S**., (**2003**), "A Flamelet Time Scale Model For Non-Premixed Combustion Including Chemical Kinetic Effects", Combustion and Flame Journal, Volume 133, Issues 1-2, pp. 189-191.

SEGERLING L. J. (**1984**), "Applied Finite Element Analysis", John Wiley and Sons, Inc., 2ª. Edição, New York, USA.

SIEGEL R., HOWELL J. R. (**1992**), "Thermal Radiation Heat Transfer", 3rd ed., Hemisphere, Washington D.C., Chap. 4, 7 e 14.

SHAW C. T. (**1992**), "Using Computational Fluid Dynamics - An Introduction to the Practical Aspects of using CFD", Prentice Hall Publications.

SMITH, D. A., COX, G. (**1992**), "Major Chemical Species in Turbulent Diffusion Flames", *Combustion and Flame*, Number 91, pp. 226-238.

SPALART P. R, JOU W.H., STRELETS M., ALLMARAS S. R. (**1997**), "Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach", *1st AFOSR Int. Conf. On DNS/LES*, Aug.4-8, Ruston, LA. In Advances in DNS/LES, C. Liu & Z. Liu Eds., Greyden Press, Colombus, OH.

STICKLES R. W., et al. (**1993**), "Innovative High Temperature Aircraft Engine Fuel Nozzle Design", *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 115, pp.439-446.

SVEHLA R. A., MCBRIDE B. J. (**1973**), "Fortran IV - Computer Program for Calculation of Thermodynamic and Transport Properties of Complex Chemical Systems", NASA, TN D-7056, January.

TECHNICAL MANUAL OVERHAUL (**1992**), "Titan Gas Turbine T-62T-32 Engine", *Division of International Harwester Company*, San Diego, CA, USA.

TEODORA R., DAVID C. H., LEE J. C. Y., MALTE P. C. (**1998**), "NOx Dependency on Residence Time and Inlet Temperature for Lean-Premixed Combustion in Jet-Stirred Reactors", *International Gas Turbine Institute - IGTI*, *ASME Turbo Expo*, Atlanta, Geórgia,USA

TOMCZAK H. J., BENELLI G., CARRAI L., CECCHINI D. (**2002**), "Investigation of a Gas Turbine Combustion System Fired with Mixtures of Natural Gas and Hydrogen", *IFRF Combustion Journal*, Article Number 200207, ISSN 1562-479X.

UGURSAL V. I., ONOVWIONA H. I. (**2006**), "Residential Cogeneration Systems: Review Of The Current Technology", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volume 10, Issue 5, pp. 389-431.

VANDEBROEK L., WINTER H., BERGHMAUS J. (**2003**), "Numerical Study of the Auto Ignition Process in Gas Mixtures Using Chemical Kinetics", *Heat Mass Transfer Journal*, ASME.

WAKABAYASHI T., *et al.* (**2002**), "Performance of a Dry Low Nox Gas Turbine Combustor Designed with a New Fuel Supply Concept", *Engineering for Gas Turbines and Power Journal*, ASME, Vol. 124, pp. 771-775.

WARNATZ J., **MAAS U., DIBBLE R. W.**, (**2006**), "Combustion – Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation", 4th Edition, Springer-Verlag Berlim Heidelberg, ISBN-10 3-540-25992-9, New York, USA, p. 378.

WEBER R., VERLAAN A., ORSINO S., LALLEMANT N. (**1999**), "On Emerging Furnace Design Methodology That Provides Substantial Energy Savings And Drastic Reductions in CO_2, CO and NOx emissions", *Journal of the Institute of Energy*, Number 72, pp.77 - 83.

WESTBROOK C., DRYER F. (**1981**), "Simplijed Reaction Mechanisms For The Oxidation Of Hydrocarbon Fuels In Flames", *Combust. Sci. Technol*., vol. 27, pp. 3l-43.

WILLIANS F. (**1985**), "Combustion Theory", Addison – Wesley Publishing Company Inc., Second Edition, London, UK.

WUNNING J. G. (**1996**), "Flammlose Oxidation von Brennstoff", PhD thesis, RWTH.

XINMING H. (**2001**), "Development of Reduced-Order Flame Models for Prediction of Combustion Instability", PHD Dissertation, Electrical and Computer Engineering, Bracksburg, Vinrginie Institute, USA.

YADIGAROGLU G., *et al.* (**1998**), "Numerical and Experimental Study of Swirling Flow in a Model Combustor", *Heat Mass Transfer Journal*, Vol. 41, No. 11, pp. 1485-1497.

YAKHOT V., ORSZAG S. A., THANGAM S., GATKI T. B., SPEZIALI C. G. (**1992**), "Developmente of Turbulent Models for Shear Flows by a Double-Expansion Technique", *Physics of Fluids*, Vol. 4, pp. 1510-1520.

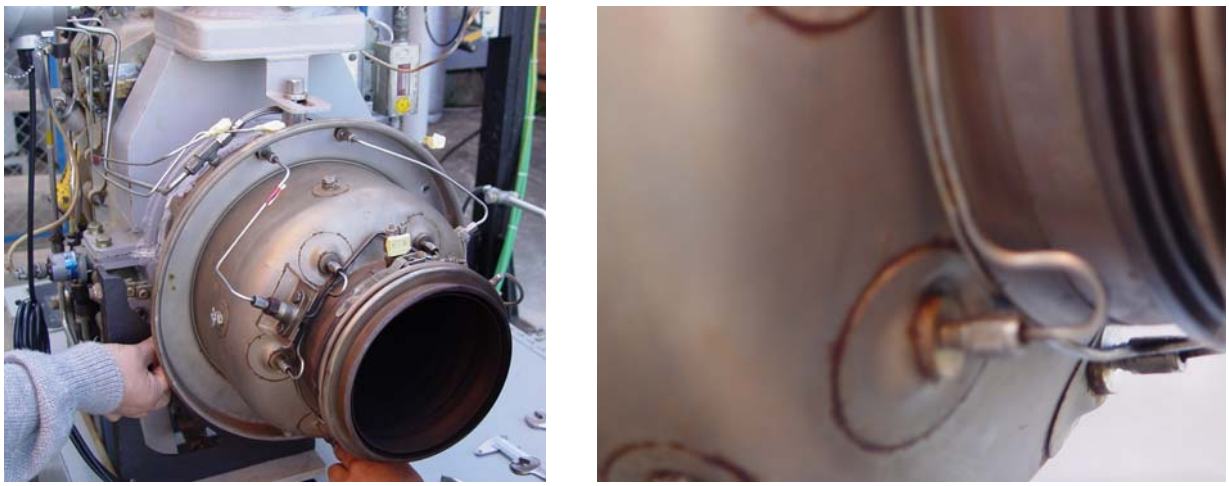
ZIMONT V. L., POLIFKE W., BETTELINI M., WEISENSTEIN W. (**1998**), "An efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure", *J.Engineering for Gas Turbines and Power*, Transactions of the ASME, Vol. 120, pp. 526-532.

Apêndice A

FOTOS DO EQUIPAMENTO MODELADO

A.1 Micro Turbina a Gás

A seguir, apresentam-se algumas fotos sobre a micro turbina a gás da Solar Industries utilizada como referência para a realização da modelagem de uma câmra de combustão do tipo anular. As fotos mostram seqüencialmente: uma vista geral da micro turbina; da carcaça da pré-câmara de combustão, com detalhamento dos tubos de alimentação dos bicos injetores de combustível; do do estator e do rotor da turbina.



(a) (b)

Figura A. 1- (a) Micro turbina montada; (b) Detalhe dos injetores na carcaça

Figura A. 2- Carcaça externa desmontada

(a)

(b)

Figura A. 3- (a) Turbina a gás e exaustor da câmara de combustão; (b) Detalhe do exaustor da câmara de combustão

Figura A. 4- Rotor da turbina a gás

A.2 Câmara de Combustão

A seguir, apresentam-se algumas fotos sobre a câmara de combustão do tipo anular utilizada como referência para o desenvolvimento da metodologia de aplicação do Cálculo da Dinâmica de Fluidos. As fotos mostram seqüencialmente: a exaustão; e o tubo de chama, com o detalhamento dos bicos injetores de combustível.

(a) (b)

Figura A. 5 - Saída da Câmara de combustão: (a) vista externa; (b) vista interna

(a) (b)

Figura A. 6 - Câmara de combustão: (a) vista externa; (b) vista interna

Figura A. 7 - Detalhe interno da câmara de combustão mostrando a conexão dos injetores de combustível à esquerda e à direita. No meio, a ignição

Figura A. 8 - Detalhe externo da câmara de combustão mostrando a conexão dos injetores de combustível

Apêndice B

TELAS DO PROGRAMA GASEQ PARA ANÁLISE TERMOQUÍMICA DOS FLUIDOS DE TRABALHO DO CFX

B.1 Interface para Entrada e Saída de Dados

A interface para entrada e saída de dados no programa GASEQ é simples e amigável. Sua identificação é feita conforme Figura B.1..

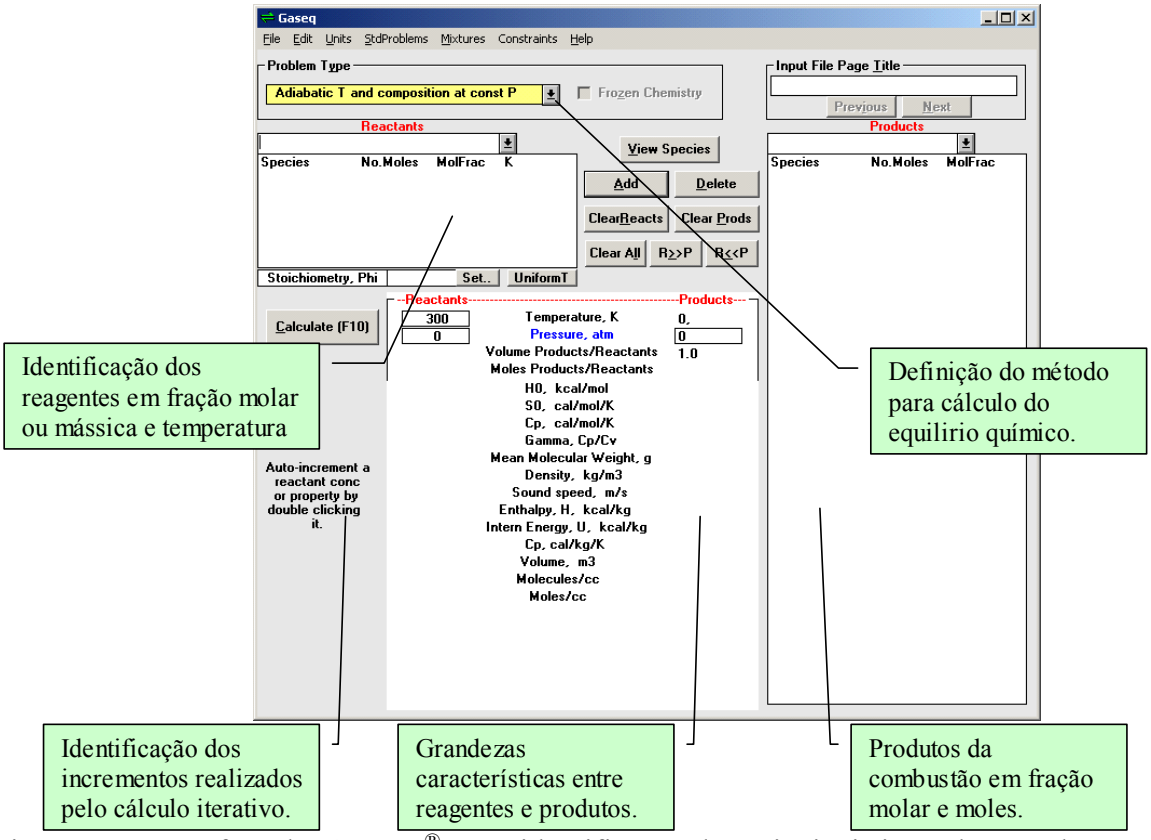


Figura B. 1- Interface do GASEQ®, com identificação dos principais itens de entrada e saída de dados

B.2 Interface com Reações em Numero de Moles

A seguir, apresenta-se a interface com dos dados da reação de combustão para o gás natural com respectivos reagentes e produtos, em termos de concentração em número de moles.

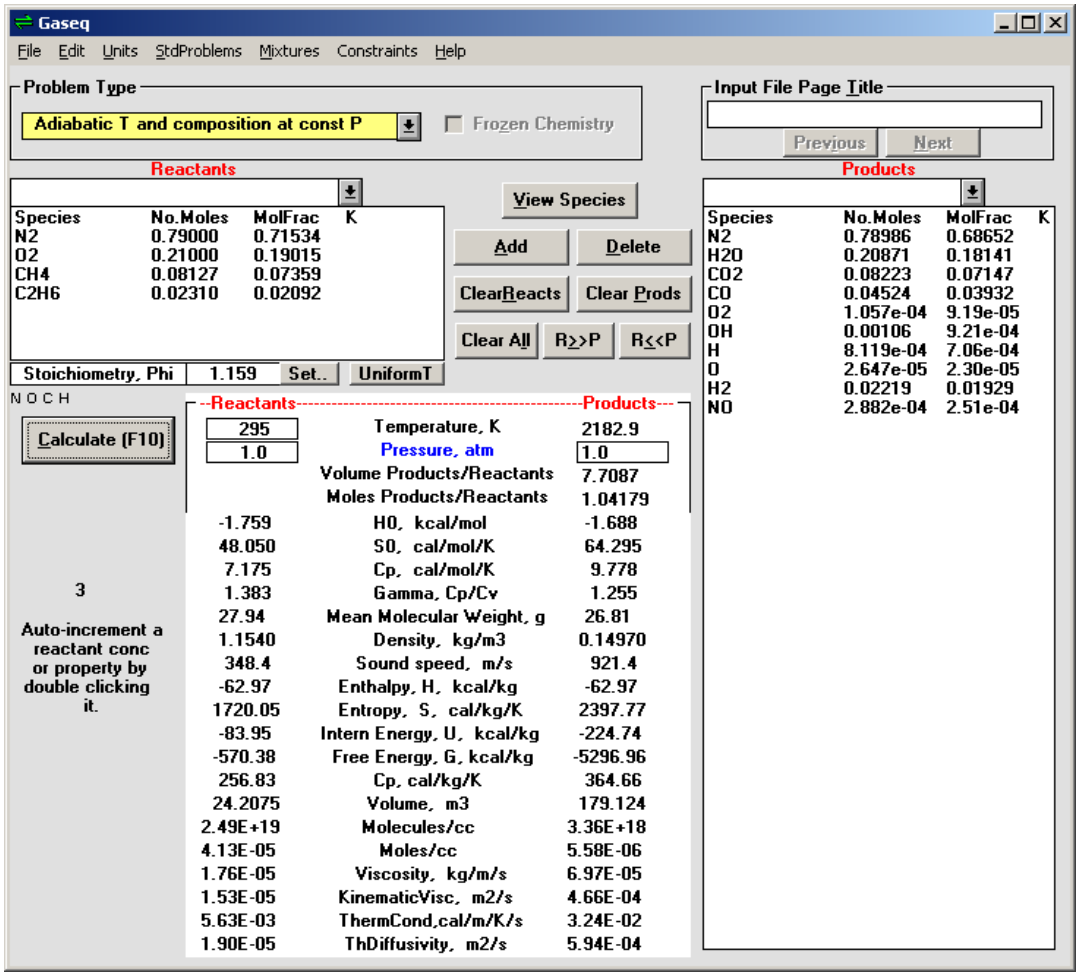


Figura B. 2 - Tela do GASEQ para o gás natural em unidade de número de mols obtida após 3 iterações

B.3 Interface com Reações em Massa

A seguir, apresenta-se a interface com dos dados da reação de combustão para o gás natural com respectivos reagentes e produtos, em termos de concentração em massa.

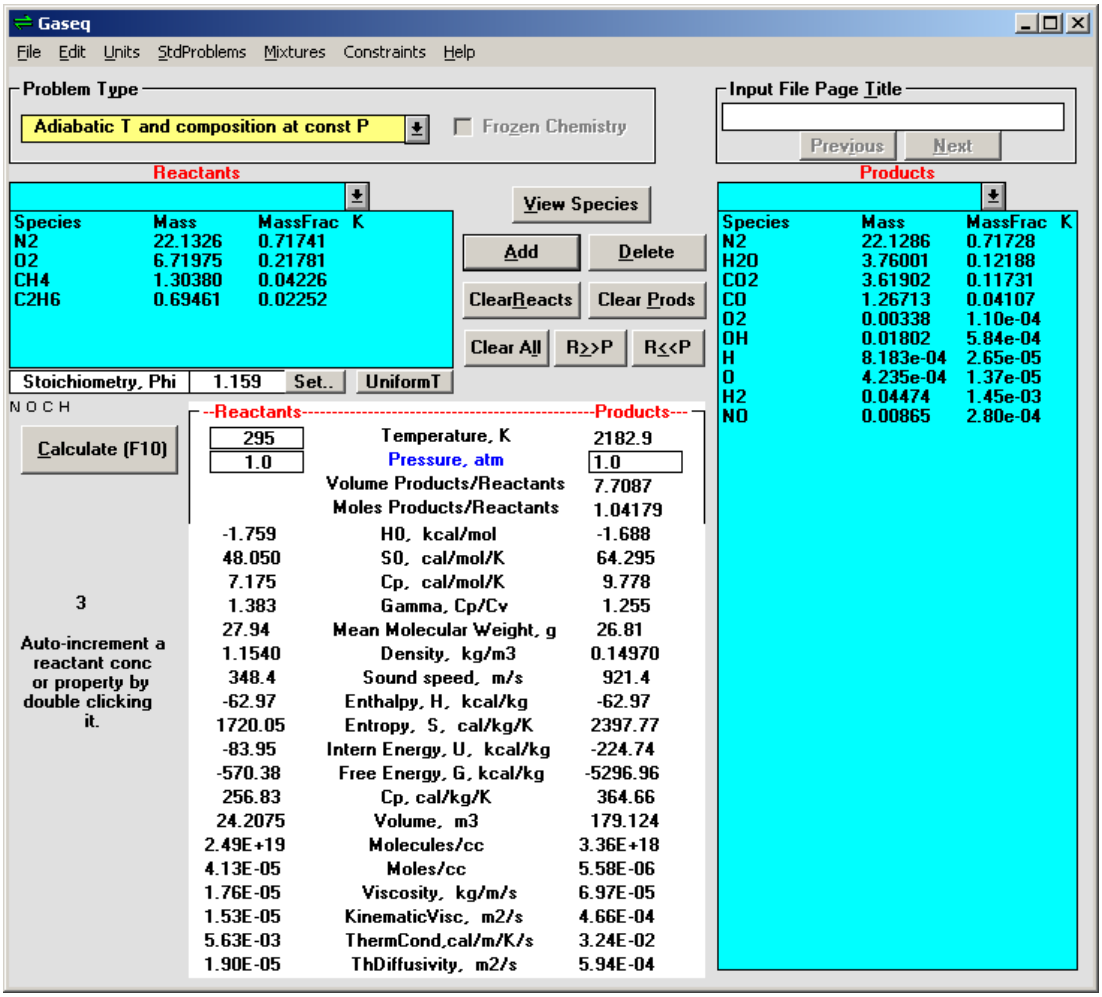


Figura B. 3 - Tela do GASEQ para o gás natural em unidade de massa obtida após 3 iterações

Apêndice C

GUIA DE UTILIZAÇÃO DO CFX PARA CÂMARAS DE COMBUSTÃO

Este guia apresenta os procedimentos necessários para o cálculo CFD pelo CFX aplicados na simulação de câmaras de combustão para micro turbinas a gás.

C.1 Definição do Problema Físico

Seja uma câmara de combustão do tipo anular de uma micro turbina a gás similar à proposta no capítulo 4. Pretende-se realizar um estudo termo-aerodinâmico, objetivando:

a) modelar a geometria;

b) estabelecer as condições de cálculo; e

c) visualizar a distribuição da velocidade, temperatura e emissão de NOx sobre um plano longitudinal paralelo ao eixo principal deste equipamento.

C.2 Definição do Domínio Geométrico

Etapa 1 – Criação da Base de Dados

1) Iniciar o software CFX-BUILD a partir do CFX launcher (ver figuras C.1 e C.2);
2) A partir do menu principal, selecionar **File > New**;
3) Criar um novo arquivo - projeto chamado Chamber.db;

4) Em ***New Model Preferences***:
    (a) Definir **Geometry Dimensions In** to **milimetres** (mm); e
    (b) Incrementar a **Global Model Tolerance** para 0.01;
5) Confirmar em **OK**.

NOTA: É importante que sejam consideradas as dimensões da geometria quando for realizada a importação a partir de um arquivo IGES. O CFX BUILD usará as unidades especificas no ***New Model Preferences***, considerando as unidades especificadas no arquivo IGES.

Etapa 2 – Criação do Modelo Geométrico

1) Acessar **File > Import** para importar a geometria criada originalmente e salva como arquivo IGES;
2) Selecionar IGES como tipo ***Source***;
3) Especificar o arquivo em IGES;
4) Confirmar em ***Apply***;
5) Quando o relatório de importação IGES aparecer na tela, clicar em **OK** para fechá-lo;
6) Clicar no ícone ***Botton View*** para ter uma visualização completa da geometria;
7) Clicar no ícone ***Display Lines*** para mostrar as linhas das superfícies no **Viewer** (ver figuras C.3);
8) Clicar em **Geometry**;
9) Selecionar **Create** and **Solid** and **B_rep**;
10) Usando o botão esquerdo do mouse, desenhar um retângulo que envolva toda a geometria;
11) Habilitar a opção ***Delete Original Surfaces*** e clicar em **Apply** para criar o modelo sólido (Ver figura C.4);

NOTA: Uma vez criado o modelo sólido, o CFX BUID habilita novos ícones para a definição das superfícies de controle, que definem as regiões onde podem ocorrer fluxos de massa e calor, bem como as regiões de obstrução e/ou paredes.

12) Selecionar o novo ícone **3D Regions**;
13) Especificar **Create** and **3D Region** and **New**;
14) Em ***Name***, digitar Combustor;
15) No item **Bounding Solids**, selecionar ***Whole of the Geometry***;
16) usandi o botão esquerdo do mouse, selecionar o modelo sólido;
17) Confirmar em ***Apply*** para criar a região;

18) Selecionar o novo ícone **2D Regions**;
19) Especificar **Create** and **2D Region** and **New**
20) Em ***Name***, digitar fuelin;
21) Mantenha item **Type** como **Standard**;
22) Movendo a geometria, se necessário, clique com o botão esquerdo do mouse na superfície que representa a entrada (admissão) do fluído de trabalho combustível;
23) Confirmar em ***Apply*** para criar a região fuelin;
24) Repetir os itens de 19 a 23 de maneira análoga para criar as regiões que representem a entrada do fluído de trabalho oxidante e saída dos gases produtos da combustão, nomeando as respectivas regiões como Airin e Outgas; e
25) Salvar o projeto no menu principal **File > Save**.

Etapa 3 – Criação da Malha

1) Clicar no ícone **Mesh**;
2) Selecionar **Set** and **Mesh Param**.;
3) Para o item **Volume Mesh Spacing**, atribuir 4 para ***Maximum Edge Length (unidade em mm)***;
4) Para o item **Surface Mesh Spacing**, selecionar a opção ***Use Volume Spacing***;
5) Confirmar em ***Apply***;
6) Selecionar **Create** and **Mesh Control**;
7) No item **Type**, selecionar **Surface** e clicar em **Value**;
8) Na nova janela, atribuir 2 para ***Maximum Edge Length(unidade em mm)*** ;
9) Confirmar em **Close**;
10) Usando o botão esquerdo do mouse, desenhar um retângulo que envolva a região onde a malha deve ser refinada a fim de discretizar saliências e reentrâncias que existam na geometria; e
11) Confirmar em ***Apply***;
12) Selecionar **Create** and **Surface Mesh**;
13) Habilitar opção ***Mesh Viewer***;
14) Confirmar em ***Apply*** para o CFX BUILD gerar e mostrar a malha de superfície na tela (ver figura C.5);

NOTA: Em certas circunstâncias, uma malha "fina", ou seja, formada por elementos pequenos, afim de discretizar todos os detalhes da geometria, pode comprometer o esforço computacional durante a realização dos cálculos.

15) Para criar o arquivo base de dados para definição das condições de cálculo, deve-se selecionar o ícone **Write File**;
16) Habilitar a opção ***Shutdown CFX –Build*** e a ação ***Write GTM File***;
17) Confirmar em **Apply** para escrever o arquivo GTM.

C.3 Definição das Condições de Cálculo

Etapa 1 – Criando uma Nova Simulação

1) Iniciar o software CFX-PRE a partir do CFX launcher (ver figura C.6);
2) Criar uma nova simulação denominada CombustorEDM.cfx usando o **General Mode**;

Etapa 2 – Importação da Malha

1) Clicar no ícone **Import Mesh** a partir do menu principal;
2) Importar a malha Combustor.GTM usando as condições padrão;

Etapa 3 – Criando uma Mistura para a Reação de Combustão

1) Abrir o **Material Editor** (ver Figura C.7);
2) Na caixa **Name** introduzir a denominação Methane Air Misture;
3) Definir **Thermodynamic State** como **Gás**;
4) A partir da lista "drop-down" denominada **Composition**, selecionar **Variable Composition Mixture**;
5) Habilitar **Include Reactions**:
    a) A partir da lista **Available Reactions**, selecionar **Methane Air WD1 NO PDF**;
    b) Clicar na seta indicativa "direita" para mover a reação para **Included Reactions List**;

NOTA: O modelo **Methane Air WD1 NO PDF** define o modelo de combustão **Eddy Dissipation Model – EDM** com uma etapa de reação do metano no ar, usando o modelo **PDF** para a emissão do NOx.

6) No mesmo painel, habilitar **Advanced Property Override** para os seguintes parâmetros:
    a) Habilitar **Refractive Index**, atribuindo-lhe o valor 1;
    b) Habilitar **Scattering Coefficient**, atribuindo-lhe o valor 0 [1/m];
    c) Habilitar **Absorption Coefficient**, atribuindo-lhe o valor 1 [1/m];

NOTA: A definição destes parâmetros usados no Modelo de Radiação permite diminuir o tempo do cálculo, desde que o CFX-Solver não tenha que calcular as propriedades da radiação para a mistura.

7) Confirmar em ***Apply*** para criar a mistura.

Etapa 4 – Definindo o Domínio de Cálculo

1) Para criar um novo domínio, clicar no ícone **Domain** (ver Figura C.8);
2) Em **Name** definir como Combustor;
3) Confirmar em **OK**;
4) Para definir as condições gerais, definir **Location** como Combustor;
5) Estabelecer **Domain Type** como **Fluid Domain**;
6) Em **Fluid List**, selecionar **Methane Air Mixture**;
7) Definir **Reference Pressure** com o valor 91630 (Pa);
8) Manter **Buoyancy** como **Non-Buoyant** a fim de que os efeitos da gravidade sejam considerados despresiveis;
9) Manter **Domain Motion** como **Stationary** a fim de indicar que o domínio físico é estacionário;
10) Para estabelecer os fluidos de trabalho, clicar na tabela **Fluid Models**;
11) Definir a opção ***Heat Transfer Model*** para **Total Energy**;
12) Definir a opção ***Turbulence Model*** para **RNG k-Epsilon**;
13) Manter a opção ***Turbulent Wall Functions*** como sendo **Scalable**;
14) Definir ***Reaction or Combustion Model*** para **Eddy Dissipation**;
15) Estabelecer ***Thermal Radiation Model*** como sendo **P1**;
16) Na seção **Component Details**, estabelecer:
    a) **CH4** como **Transport Equation**;
    b) **CO2** como **Transport Equation**;
    c) **H2O** como **Transport Equation**;
    d) **N2** como **Constraint**;
    e) **NO** como **Transport Equation**;
    f) **O2** como **Transport Equation**;
8) Confirmar em **OK** para definir as propriedades do domínio.

NOTA: A definição **Transport Equation** indica que o componente nos produtos da combustão tem sua fração mássica em relação a massa total dos produtos calculada em função da equações de transporte de massa e energia. Na definição **Constraint**, a fração mássica é calculada a partir da soma das frações mássicas dos outros

componentes subtraída.do valor 1 (unidade). Deve ser associada ao componente que pela natureza da reação de combustão apresenta maior fração mássica nos reagentes.

Etapa 5 – Definição das Condições de Contorno

1) Para criar a condição de contorno na entrada de combustível, clicar no ícone **Boundary Conditions** (ver Figura C.9);
2) Em **Name**, selecionar Fuelin e confirmar em **OK**;
3) No painel **Basic Settings**:
    a) Selecionar **Boundary Type** como sendo **Inlet**;
    b) Especificar **Location** como sendo fuelin;
4) Clicar na tabela **Boundary Details**:
    a) Definir **Flow Regime** como **Subsonic**;
    b) Estabelecer a opção **Mass and Momentum** para **Mass Flow** e atribuir o valor 0.019 (kg/s);
    c) Definir **Turbulence** como **Médium (Intensity = 5 %)**;
    d) Estabelecer **Heat Transfer** para **Static Temperature** e atribuir o valor 295 (K);
    e) Para **Thermal Radiation**, selecionar **Option** para **Local Temperature**;
    f) Condicionar para **Component Details**:
        - **Mass Fraction** do **CH4** para 1;
        - **Mass Fraction** para os demais componentes para zero;
5) Confirmar em **OK**;
6) Para criar a condição de contorno na entrada de ar, clicar no ícone **Boundary Conditions** novamente;
7) Em **Name**, selecionar Airin e confirmar em **OK**;
8) No painel **Basic Settings**:
    a) Selecionar **Boundary Type** como sendo **Inlet**;
    b) Especificar **Location** como sendo Airin;
9) Clicar na tabela **Boundary Details**:
    a) Mantenha **Flow Regime** como **Subsonic**;
    b) Estabelecer a opção **Mass and Momentum** para **Mass Flow** e atribuir o valor 0.1593 (kg/s);
    c) Definir **Turbulence** como **Médium (Intensity = 5 %)**;
    d) Estabelecer **Heat Transfer** para **Static Temperature** e atribuir o valor 473 (K);

e) Para **Thermal Radiation**, selecionar **Option** para **Local Temperature**;

f) Condicionar para **Component Details**:

- **Mass Fraction** do **O2** para 0.232;
- **Mass Fraction** para os demais componentes para zero;

10) Confirmar em **OK**;

11) Para criar a condição de contorno na saída dos gases produtos da combustão, clicar novamente no ícone **Boundary Conditions**;

12) Em **Name**, selecionar OutGas e confirmar em **OK**;

13) No painel **Basic Settings**:

a) Selecionar **Boundary Type** como sendo **Outlet**;

b) Especificar **Location** como sendo OutGas;

14) Clicar na tabela **Boundary Details**:

a) Mantenha **Flow Regime** como **Subsonic**;

b) Estabelecer a opção **Mass and Momentum** para **Static Pressure** e atribuir o valor 0 (Pa) para **Average Relative Pressure**;

c) Para **Thermal Radiation**, selecionar **Option** para **Local Temperature**;

15) Confirmar em **OK**;

16) Para criar a condição de contorno de simetria nas superficies laterais obtidas da secção do modelo 3D em um volume correspondente a 1/6 do volume total, clicar novamente no ícone **Boundary Conditions**;

17) Em **Name**, selecionar SurfaceLateral1 e confirmar em **OK**;

18) Repetir do item (16) a (17) para definir a condição de simetria para as demais superficies laterais.

NOTA: As demais superfícies que representam as paredes são pré-definidas como **Wall** para **Boundary Type**, com as seguintes propriedades: (a) paredes de superfícies novas; (b) sem escorregamento; (c) adiabáticas; (d) emissividade unitária; (e) não-catalíticas, ou seja, não afetam as reações químicas.

Etapa 6 – Definição das Condições Iniciais

1) Selecionar o ícone **Global Initialisation** a partir do menu principal (ver Figura C.10);
2) Manter **Velocity Type** como sendo **Cartesian**;
3) Definir **Cartesiann Velocity Components** para **Automatic**;
4) Manter **Static Pressure**, **Temperature**, **K**, **Epsilon** e **Radiation Intensity** como sendo **Automatic**;

5) Considerando que o domínio esteja preenchido por ar, definir em **Component Details**:
    a) **CH4**, **CO2**, **H2O** e **NO** para **Automatic**;
    b) O2 para **Automatic with Value** e atribuindo-lhe o valor 0.232;
6) Confirmar em **OK**;

Etapa 7 – Definição das Condições de Convergência

1) Clicar no ícone **Solver Control** (ver Figura C.11);
2) Manter **Advection Scheme Option** para **High Resolution**;
3) Na janela **Convergence Control**, definir os seguintes valores:
    a) **Timescale Control** para **Physical Timescale**;
    b) Definir **Physical Timescale** para 0.025 [s];
    c) **Goal Error** para 10E-4;
    d) **Max. No. Iterations** para 120;
4) Usar o padrão **Convergence Criteria**;
5) Na tabela **Advanced Option**, habilitar **Global Dynamic** para **ON**;
6) Confirmar em **OK**;
7) Para iniciar o cálculo no CFX Solver, selecionar o ícone **Write Definition File** (Ver figura C.12);
8) Selecionar **Operation** para **Start Solver Manager with Def file**;
9) Em **Report Summary**, desabilitar **Interface Connections** e habilitar **QUIT CFX Pre**;
10) Confirmar em **OK**;
11) Confirmar em **YES** quando o CFX questionar se é necessário salvar o arquivo CombustorEDM.cfx.

C.4 Obtenção da Solução Numérica

Etapa 1 – Criando um novo Arquivo de Resultados

1) Iniciar o software CFX-Solver (ver figura C.13) a partir do CFX launcher;
2) No menu principal, acessar ícone **Define Run**;
3) Quando um novo painel aparecer, especificar **Definition File** para CombustorEDM.def,
4) Especificar **Initial Values File** para CombustorEDM.res,

5) Se computador tiver dois processadores, selecionar em **Run Mode** para **Local Parallel**;
6) Clicar em **Start Run**;
7) Quando o cálculo terminar (ver Figura C.14), clicar em **Post-Process Results** para ver os resultados;
8) Quando o painel **Start CFX Post** aparecer, habilitar opção **Shut down Solver Manager** e Confirmar em **OK**;

Etapa 2 – Visualização dos Resultados

1) Iniciar o software CFX-POST a partir do CFX launcher (ver figura C.15);
2) No menu principal, acessar **File > Open** para abrir o arquivo de resultados CombustorEDM.res;
3) Quando aparecer uma janela com a geometria do problema físico no formato WIREFLAME, usar o mouse e os ícones de Zoom para visualizar toda a geometria na tela;
4) Criar dois Planos de Referência a partir do ícone **Create Plane** no menu principal, denominando o mesmo por Plane 1 e Plane 2 usando as coordenadas em milimetros dos seguintes pontos, acessando *Geometry* e fazendo *Method* como Three points na sub-tela de criação de planos :
   (x1, y1, z1) = 0.28 , 0 , 0
   (x2, y2, z2) = -0.06 , 0 , 0.31
   (x3, y3, z3) = 0.3 , 0.1 , 0
5) Em *Color*, colorir Plane 1 usando **Variable** como sendo **Velocity** e confirmando em APPLY(ver figura C.16);
6) Em *Color*, colorir Plane 2 usando **Variable** como sendo **Temperature** e confirmando em APPLY (ver figura C.17);
7) Salvar estado de soluções numéricas acessando no menu principal **File > Save State** para CombustorEDM.std;

NOTA: As demais funções do CFX POST, tal como do CFX Solver e CFX Build são detalhadas e exemplificadas no Manual do Usuário do softwate ANSYS CFX.

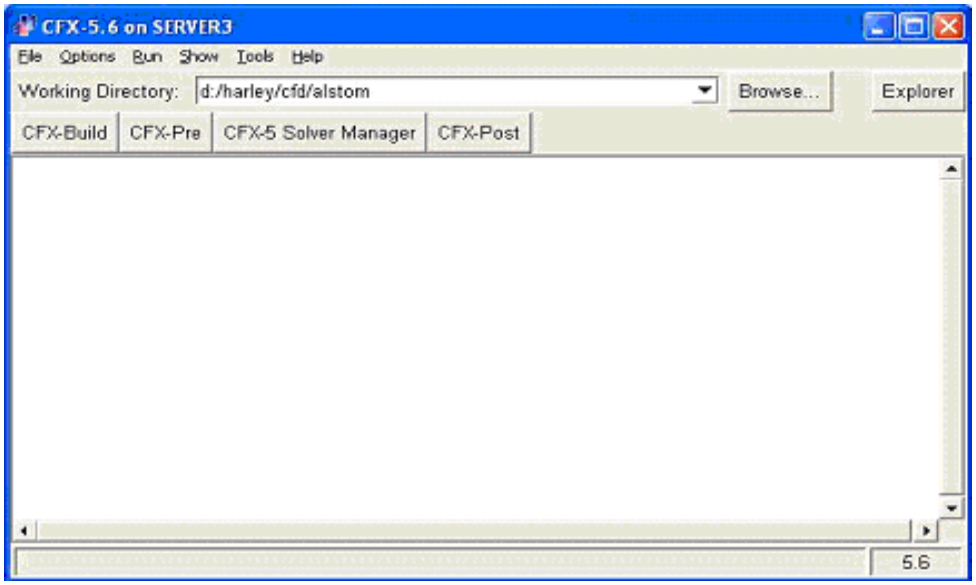


Figura C. 1- Tela do CFX launcher para acessar ferramentas CFX

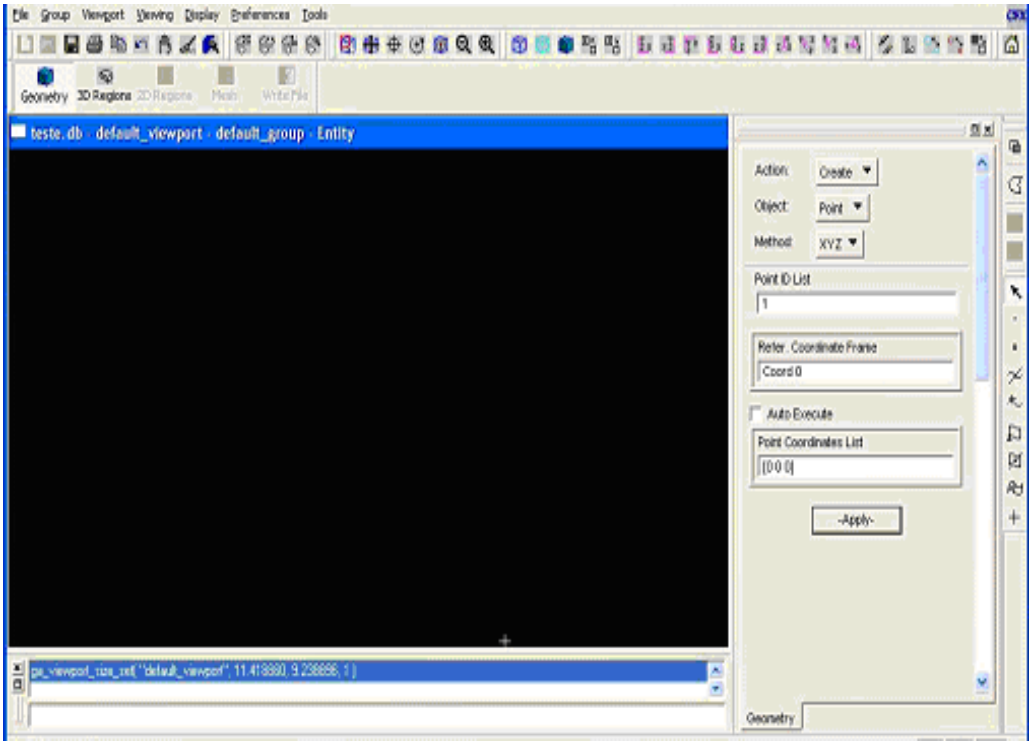


Figura C. 2 - Tela principal do CFX Build para a definição da geometria do problema

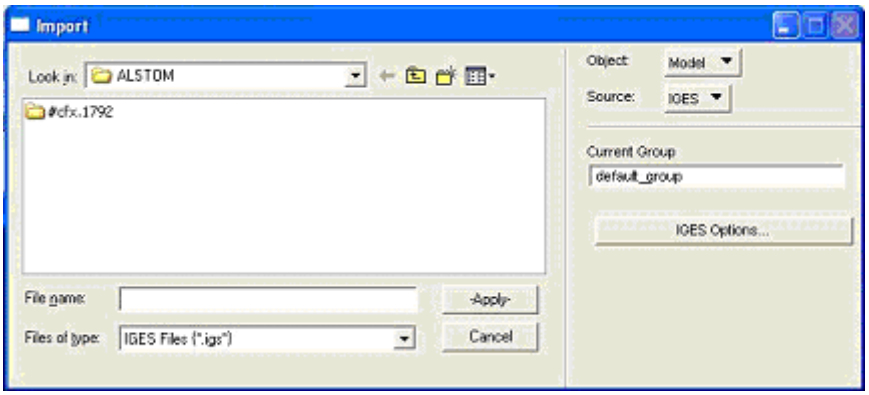


Figura C. 3 - Tela do CFX Build para importação do modelo no formato IGES

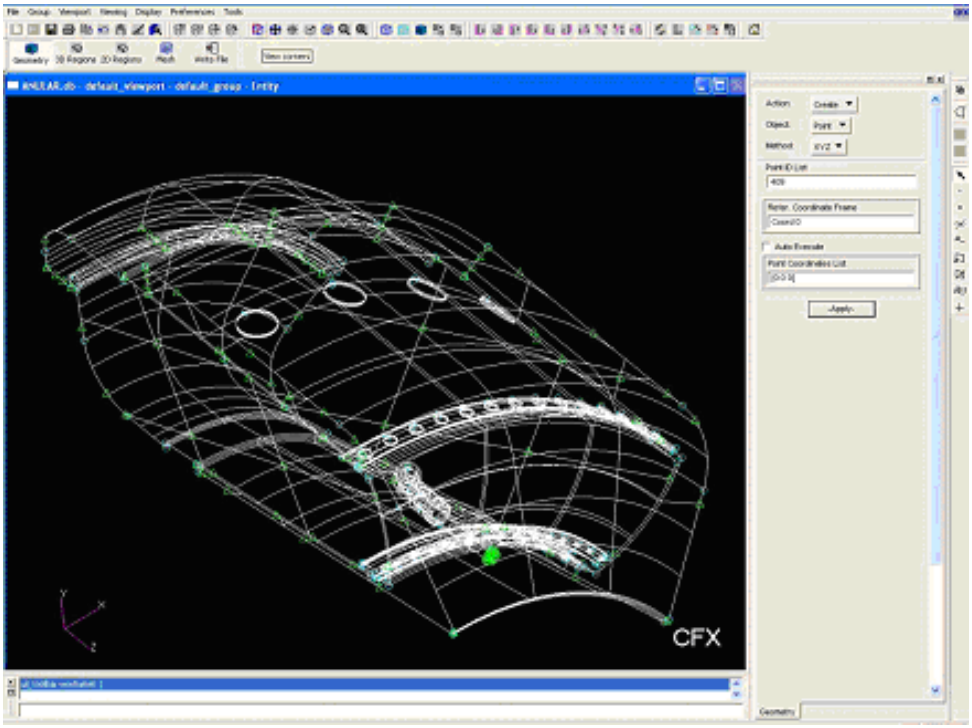


Figura C. 4 - Tela do CFX Build para visualização do modelo sólido criado

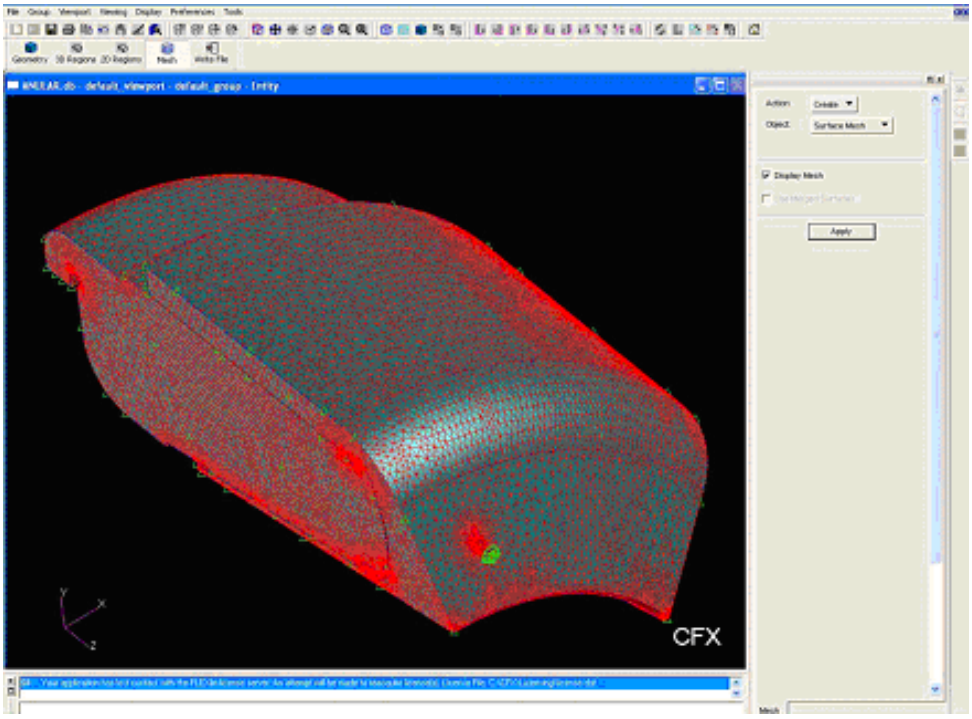


Figura C. 5 - Tela do CFX Build para visualização da malha

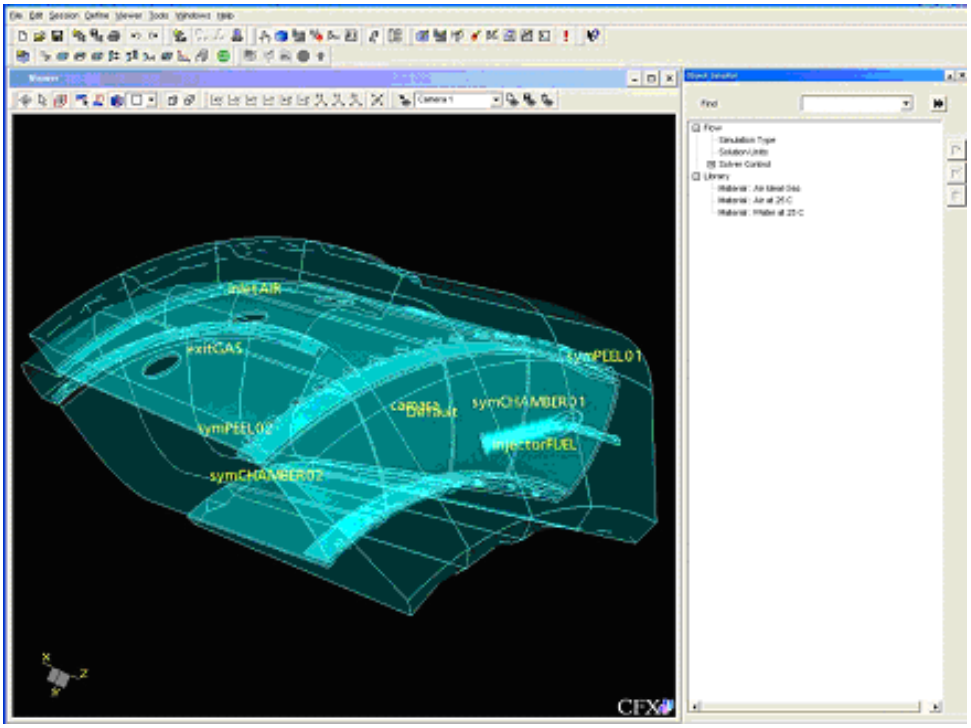


Figura C. 6 - Tela principal do CFX Pre para a definição das condições de cálculo

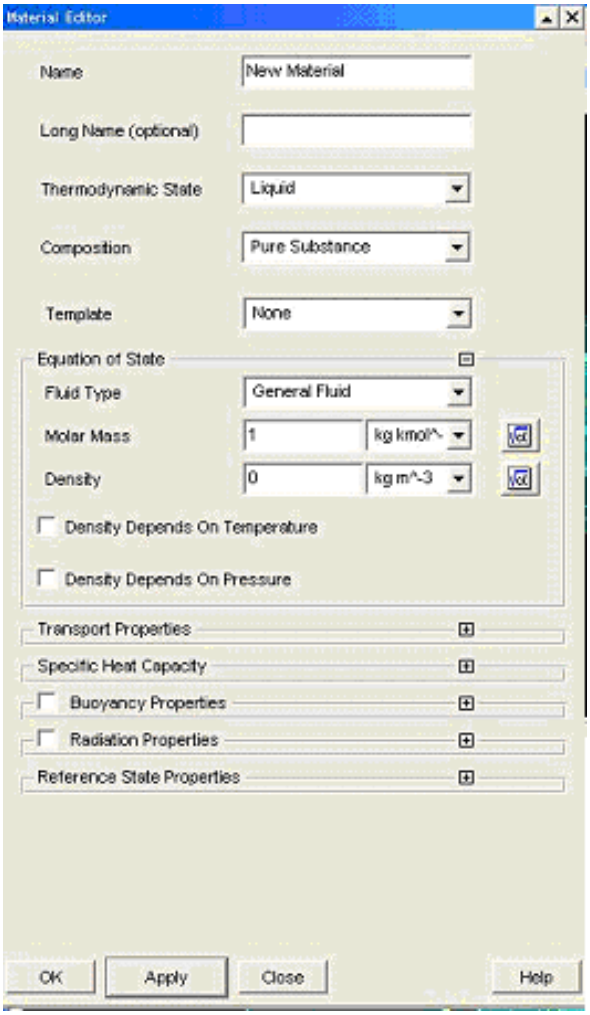


Figura C. 7 - Tela do CFX Pre para a definição da mistura para a Reação de Combustão

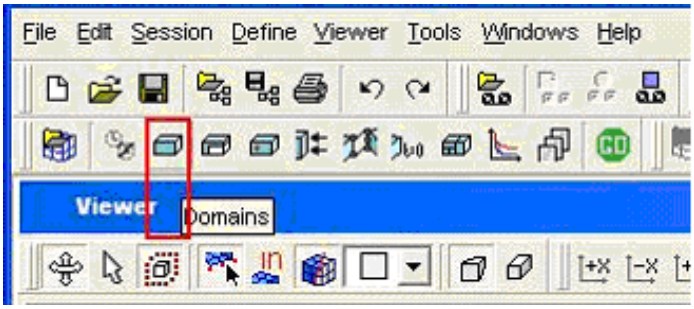


Figura C. 8 - Detalhe na tela do CFX Pre para a definição do domínio de cálculo

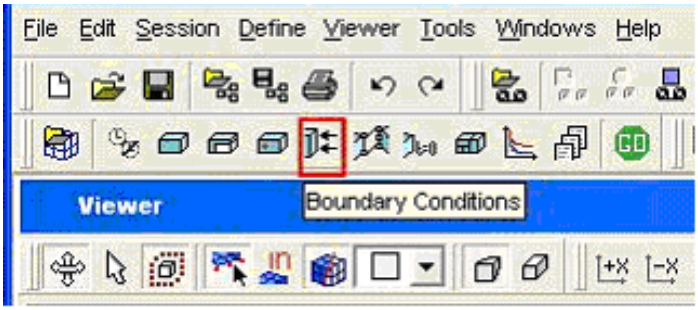


Figura C. 9 - Detalhe na tela do CFX Pre para a definição das condições de contorno

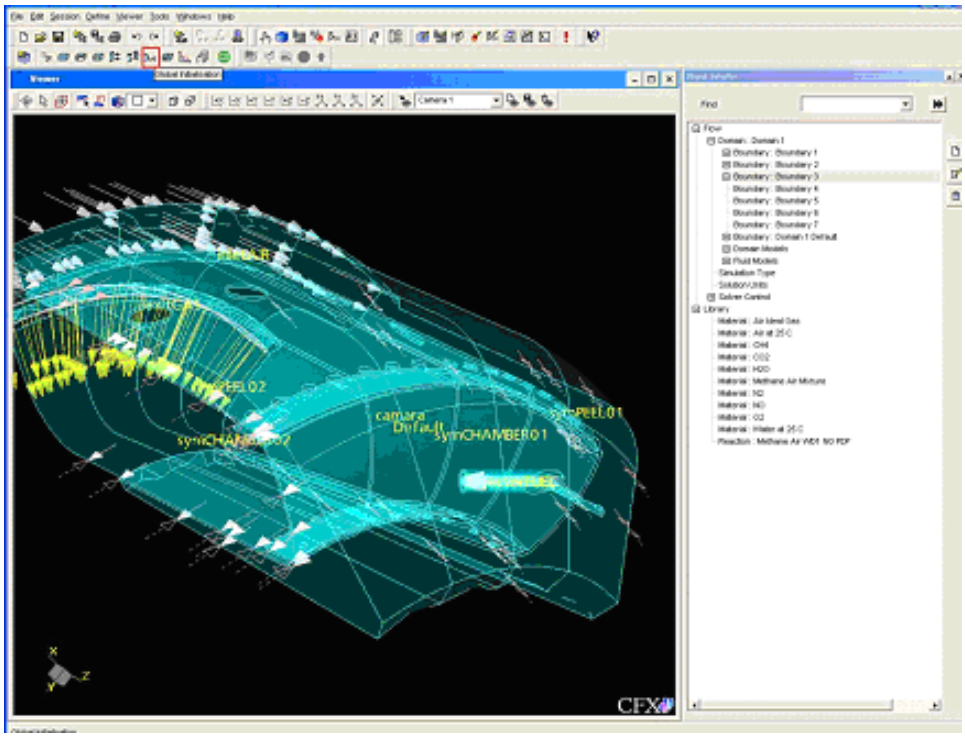


Figura C. 10 - Tela do CFX Pre para a definição das condições iniciais

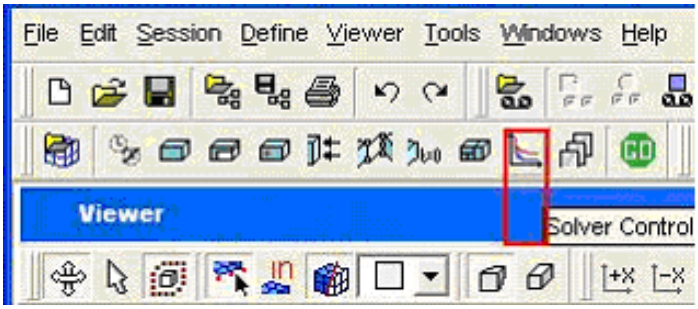


Figura C. 11 - Detalhe na tela do CFX Pre para a definição das condições de convergência

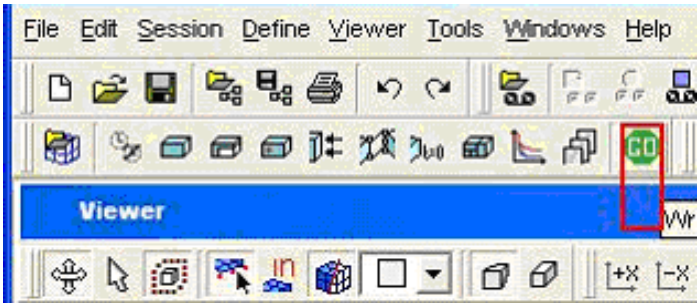


Figura C. 12 - Detalhe na tela principal do CFX Pre para iniciar iniciar calculos no CFX Solver

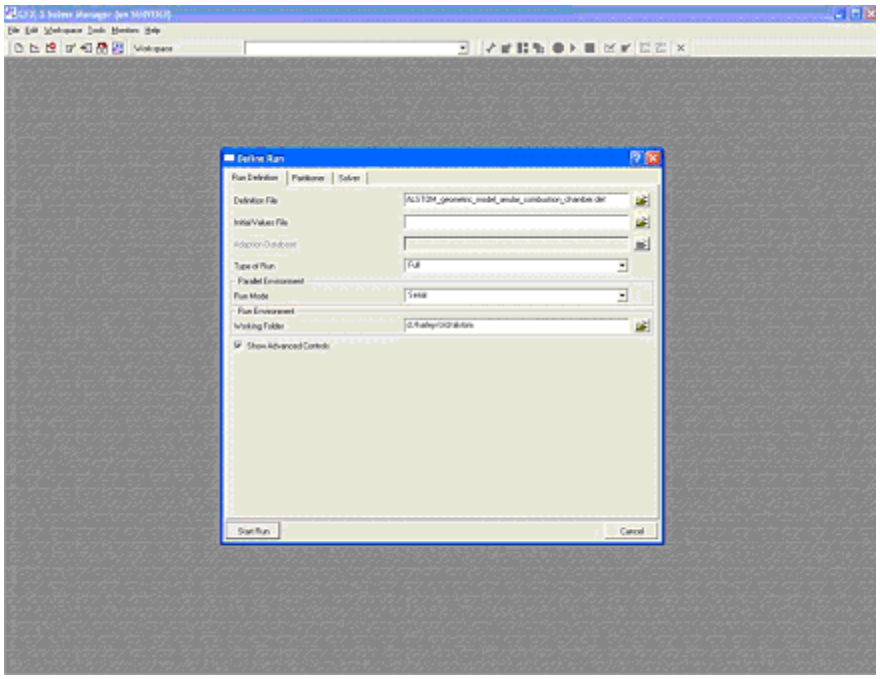


Figura C. 13 - Tela principal do CFX Solver para a execução dos cálculos

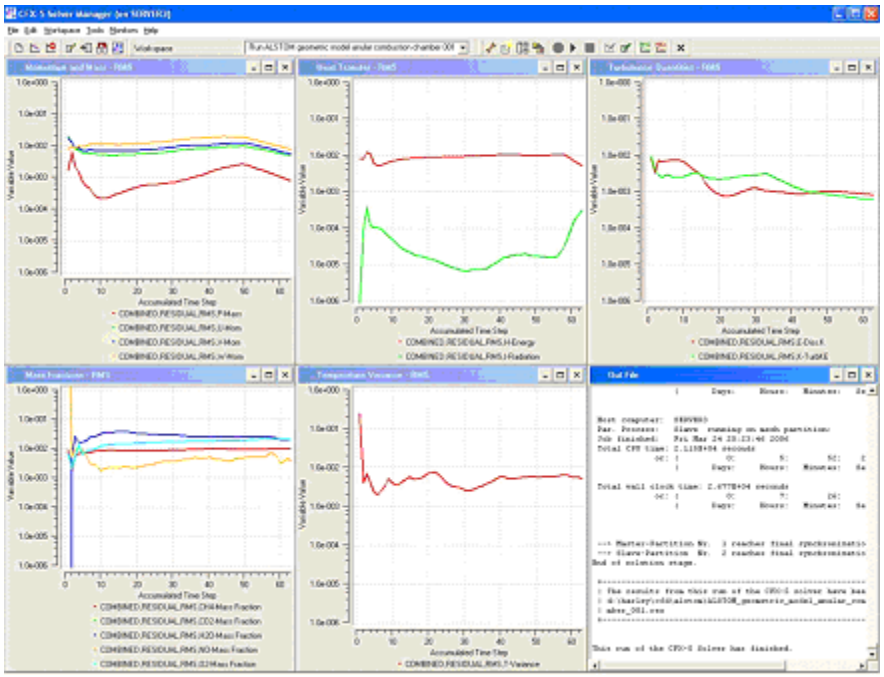


Figura C. 14 - Tela do CFX Solver após a execução dos cálculos

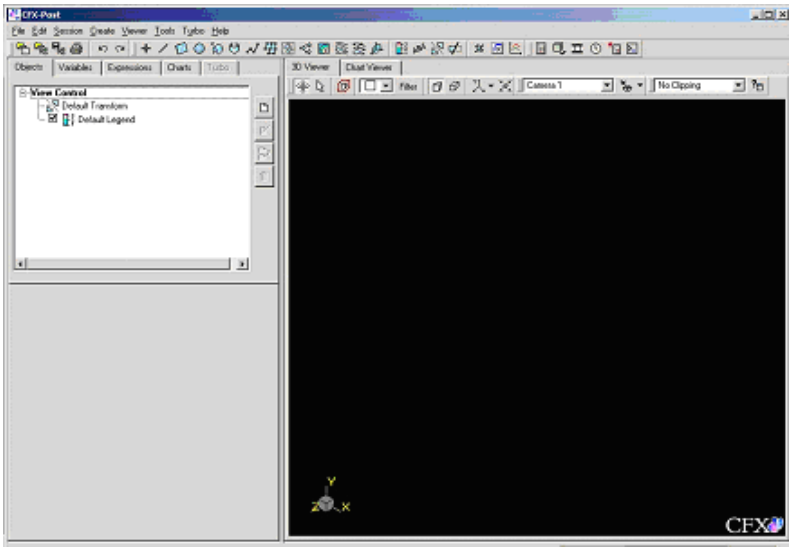


Figura C. 15 - Tela principal do CFX Post para visualozação dos resultados

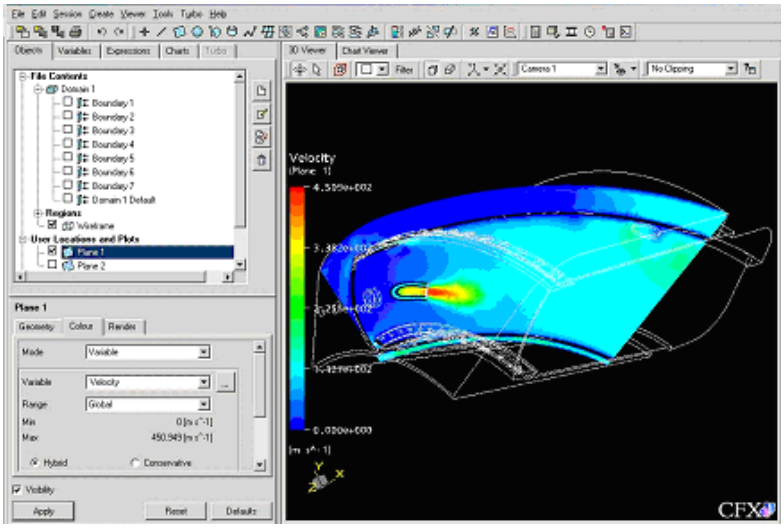


Figura C. 16 - Tela do CFX Post com plano de referência 1 sobre a distribuição de velocidade do escoamento

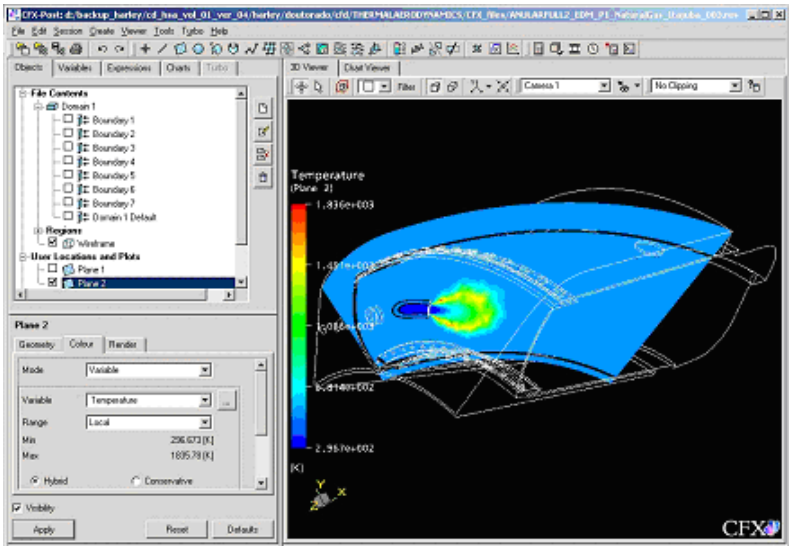


Figura C. 17 - Tela do CFX Post com plano de referência 2 sobre a distribuição de temperatura

Apêndice D

EQUACIONAMENTO DE UM MODELO DE TURBULÊNCIA

D.1 Escoamento Turbulento

No escoamento turbulento, as grandezas físicas têm comportamento estocástico, pelo qual as mesmas podem ser representadas, por exemplo, pela forma geral atribuída a grandeza física velocidade do escoamento U, dada na forma $U = \tilde{U} + u$, onde $\tilde{U}$ é a velocidade média do escoamento no tempo (quando a vazão média está em regime permanente) e **u** é a parte flutuante no tempo.

O escoamento turbulento pode ser caracterizado pelos seguintes parâmetros:

a) **Irregularidade**: a vazão turbulenta é irregular, randômica e caótica. O escoamento consiste de um espectro de diferentes escalas (tamanhos de camadas), onde as maiores camadas são da ordem da geometria do escoamento (isto é, espessura da camada limite, largura do jato, etc.). No final do espectro, tem-se as menores camadas, as quais são afetadas pelas forças viscosas (tensões) dissipadas na energia interna;

b) **Difusibilidade:** no escoamento turbulento a difusibilidade aumenta. Isto significa que a taxa de expansão das camadas limites, jatos, etc. aumentam na medida que o escoamento torna-se mais turbulento. A turbulência aumenta a troca de quantidade de movimento nas camadas limites e reduz ou atrasa, conseqüentemente, o descolamento da camada limite à jusante dos corpos, tais como, cilindros, aerofólios e carros. O aumento da

difusibilidade também aumenta a resistência (atrito na parede) nos escoamentos internos, tais como em canais e tubos;

c) **Números de Reynolds grandes**: o escoamento turbulento ocorre em grandes números de Reynolds. Por exemplo, a transição do escoamento laminar para turbulento em tubo com água ocorre para $Re_D \approx 2300$ e nas camadas limites em $Re_X \approx 100000$;

d) **Tridimensional**: o escoamento turbulento é sempre tridimensional, conforme a Equação de Navier Stokes. No entanto, quando as equações são tratadas com valores médios no tempo, pode-se considerar o escoamento como bidimensional;

e) **Dissipação**: o escoamento turbulento é dissipativo, significando que a energia cinética nas menores camadas são transformadas em energia interna devido ao efeito dissipativo na energia. As menores camadas recebem a energia cinética a partir das camadas maiores adjacentes, que por sua vez, recebem sua energia das maiores camadas e, assim, sucessivamente. Este processo de transferência de energia a partir das camadas de turbulência de maior escala para as de menor escala é conhecido como *Processo em Cascata*;

f) **Continuidade**: embora existam as menores escalas de turbulência no escoamento, eles são muito maiores do que a escala molecular. Desta forma, o escoamento pode ser tratado como um meio contínuo.

D.2 Energia Cinética Turbulenta e Dissipação da Energia devido à Turbulência

As escalas de turbulência **κ** são distribuídas sobre um intervalo de escalas, as quais podem interagir entre si e fornecer a dissipação da energia.

Para caracterizar o efeito da turbulência na energia transportada pelo escoamento, pode-se utilizar o conceito de Espectro da Energia **E(κ)**, a qual integrada em função da escala de turbulência **κ** num intervalo de **κ** a **κ + dκ,** permite definir um parâmetro conhecido como Número do Espaço de Onda, dado pela expressão:

$$E(\kappa).d\kappa \tag{D.1}$$

A equação D.1 expressa o efeito das escalas de turbulência no escoamento devido à energia cinética turbulenta **k**.

A Fig. D.1 mostra a variação do espectro de energia **E(κ)** com a escala de turbulência **κ**.

A dimensão do Número de Onda é equivalente ao comprimento da escala de turbulência, isto é, pode-se considerar que o Número de Onda é inversamente proporcional ao raio do vórtice. Desta forma, a energia cinética turbulenta total pode ser obtida pela integração sobre o número de onda, dado pela equação:

$$k = \int_0^{\infty} E(k).dk \tag{D.2}$$

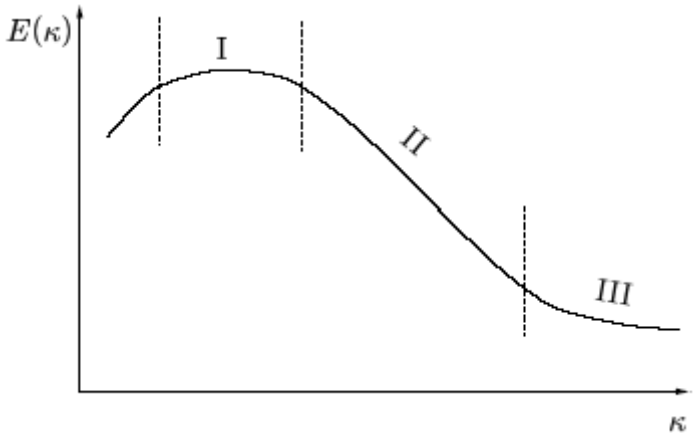


Figura D. 1- Espectros da energia cinética E(κ): I representa a região com grande escala de turbulência, energia contem vórtices; II representa a sub região inercial; e III representa a região com pequena escala de turbulência, meios isotrópicos, Davidxon (2003)

A energia cinética **k** é a soma da energia cinética das três componentes da velocidade flutuante em relação ao eixo de coordenadas, dado pela equação:

$$k = \frac{1}{2}.\left(\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}\right) = \frac{1}{2}.\overline{u_i.u_i} \tag{D.3}$$

Onde **u**, **v** e **w** representam as projeções da velocidade do escoamento no sistema de coordenadas cartesianas **x**, **y** e **z**; $\mathbf{u_i}$ é a *Notação Indicial de Einstein* representativa destas projeções da velocidade do escoamento.

Do espectro da energia **E** mostrado pela Fig. D.1, identifica-se as seguintes regiões:

I. Subregião de alta turbulência: nesta região, tem-se vórtices de grande intensidade, os quais carregam muita energia, interagindo com o escoamento médio e extraindo energia deste escoamento para as camadas com vórtices com menor intensidade. Neste caso, a velocidade e o comprimento da intensidade do vórtice são representados por U e l, respectivamente;

II. Subregião inercial, cuja existência está vinculada ao alto Número de Reynolds (escoamento turbulento desenvolvido). As camadas nesta região representam à região média, que permite o transporte de energia, segundo um efeito cascata. A energia por unidade de

tempo (ε) é extraída das camadas de menor energia cinética **κ** (Fig. D.1) e transferidas para as camadas de maior energia cinética **κ** (região de dissipação). O tamanho destas camadas obedece uma proporção inversa da energia cinética (**1/κ**). Em termos de análise dimensional, a energia E(k) pode ser dada pela seguinte equação:

$$E(k) = C.\varepsilon^{2/3}.\kappa^{-5/3} \qquad (D.4)$$

Onde **C** é uma constante de proporcionalidade.

A equação D.4 representa uma importante lei conhecida como Lei do Espectro de Kolmogorov, a qual estabelece que, se o escoamento é turbulento desenvolvido (altos números de Reynolds), o espectro de energia deve decair de uma potência igual a -5/3. Esta formulação é frequentemente utilizado em testes experimentais e em soluções numéricas dos tipos DNS ("Direct Numerical Simulation") e LES ("Large Eddy Simulation"), onde modelos de escoamento podem ser aplicados, utilizando o Método de Elementos Finitos ou o Método de Volumes Finitos para caracterizar escoamentos turbulentos; e

III. Região de Dissipação, onde as camadas dos vórtices são pequenas e isotrópicas. As escalas são descritas pelas **Escalas de Kolmogorov**, dadas pelas seguintes expressões:

$$\upsilon = (\nu.\varepsilon)^{1/4},\ \eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4},\ \tau = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \qquad (D.5)$$

Onde **υ** representa uma escala de velocidade; **ν** representa uma escala de viscosidade; **ε** representa uma escala de energia de dissipação; **η** é uma escala de comprimento da vorticidade; e **τ** é uma escala de tempo.

D.3 Modelos de Turbulência

Considerando o formato usual de dividir as variáveis do escoamento turbulento em uma parte média (indepedente do tempo) e a outra parte flutuante no tempo, podem-se obter as seguintes equações para a velocidade e a pressão:

$$U_i = \tilde{U}_i + u_i \qquad (D.6.a)$$

$$P = \tilde{P} + p \qquad (D.6.b)$$

Uma razão para que seja feita a decomposição das variáveis nas equações D.6 justifica-se pelo fato que durante a medição das quantidades relativas ao escoamento, usualmente interessa mais o valor médio do que os valores com histórico no tempo. Uma

outra razão é que a solução numérica da Equação de Navier Stokes requeria também uma resolução suave no tempo (o escoamento turbulento é sempre em regime não permanente).

A equação da continuidade e a equação de Navier Stokes, por definição, são dadas pelas seguintes equações diferenciais:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \bullet \left(\rho . U_i\right) = 0 \tag{D.7}$$

$$\frac{\partial \left(\rho . U_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho . U_i . U_j\right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu . \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}.\delta_{ij}.\frac{\partial U_k}{\partial x_k}\right)\right] \tag{D.8}$$

Admitindo que o escoamento seja incompressível (Número de Mach menor do que 0.3), o quarto termo da dilatação no lado direito da equação D.8 pode ser desprezado, resultando:

$$\frac{\partial \left(\rho . U_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho . U_i . U_j\right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu . \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\right] \tag{D.9}$$

Notar que é usado o temo "incompressível" no sentido de que a densidade é independente da pressão ($\partial P / \partial \rho = 0$), porém não significa que a densidade seja constante; a mesma pode ser dependente, por exemplo, da temperatura ou da concentração das espécies.

Inserindo as equações D.6.a e D.6.b na equação D.7 e na equação D.8 , respectivamente, obtém-se a equação da continuidade e de Navier Stokes médias no tempo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \bullet \left(\rho . \tilde{U}_i\right) = 0 \tag{D.10}$$

$$\frac{\partial \left(\rho . \tilde{U}_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho . \tilde{U}_i . \tilde{U}_j\right) = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu . \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right) - \rho . \overline{u_i . u_j}\right] \tag{D.11}$$

O novo termo $\overline{u_i . u_j}$, que aparece no lado direito da equação D.11, é denominado como **Tensor de Reynolds**. Este tensor é simétrico (por exemplo, $\overline{u_1 . u_2} = \overline{u_2 . u_1}$). Este termo adicional na equação D.11 representa as tensões devido à turbulência, cujo valor é desconhecido e deve ser determinado por simulação.

Esta formulação também é conhecida como **Método de Média Ponderada de Favre**, pois a solução numérica pode calcular as variáveis em função do seu valor médio ponderado relativamente à massa e/ou ao volume para todos os elementos da malha, que discretiza o domínio físico em estudo.

A técnica utilizada para o equacionamento da turbulência pode ter diferentes abordagens. Uma delas é a **RANS** ("Reynolds Averaged Navier Stokes"), a qual é detalhada no anexo E.

O "problema de fechamento" das equações D.10 e D.11 passa pelo modelamento do termo $\overline{u_i.u_j}$: o número de incógnitas (dez, sendo três devido às projeções das velocidades, uma devido à pressão, e seis devido às tensões de deformação linear e angular) é maior do que o nùmero de equações (neste caso, quatro, sendo uma a equação da continuidade e as três projeções da equação de Navier Stokes).

Para um escoamento em regime permanente numa camada limite bidimensional (isto é, camada limite ao longo de uma placa plana, canal, tubo, jato, etc), tem-se:

$$\tilde{V} << \tilde{U}, \quad \frac{\partial}{\partial x} << \frac{\partial}{\partial y} \tag{D.12}$$

Desta forma, manipulando a equação (D.11), resulta:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho.\tilde{U}.\tilde{U}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho.\tilde{V}.\tilde{U}\right)=-\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu.\frac{\partial \tilde{U}}{\partial y}-\rho.\overline{u.v}\right] \tag{D.13}$$

Onde $\mathbf{x = x_1}$ denota a coordenada da linha de corrente e $\mathbf{y = x_2}$ é a coordenada normal ao escoamento. Freqüentemente, a gradiente de pressão na equação D.13 é adotada ser nula em muitos problemas físicos testados.

A tensão cisalhante devido ao efeito viscoso $\mu.\partial\tilde{U}/\partial y$ no lado direito da equação D.13 contribui para o aparecimento da turbulência, conhecida como Tensão Cisalhante Turbulenta total, a qual pode ser calculada pela equação:

$$\tau_{Tot} = \mu.\frac{\partial \tilde{U}}{\partial y} - \rho.\overline{u.v} \tag{D.14}$$

Na região próxima das paredes, a tensão cisalhante total é aproximadamente constante e igual a tensão cisalhante na parede, devido aos efeitos viscosos, conforme mostra a Fig. D.2 obtida de dados experimentais, Davidson (2003).

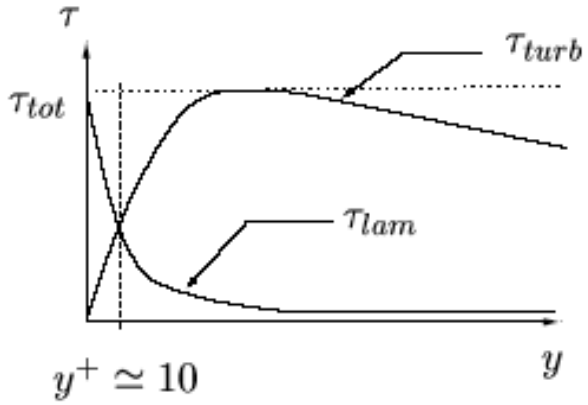


Figura D. 2 Tensão cisalhante do escoamento próxima a uma parede, Davidson (2003)

Da figura D.2, nota-se que a tensão cisalhante total é constante somente na parede; por outro lado, à medida que se afasta da parede, a tensão cisalhante total decresce (em um canal com escoamento desenvolvido, esta tensão decresce linearmente por uma distância normal a parede).

Na parede, a tensão cisalhante turbulenta desaparece com as projeções da velocidade **u = v = 0**, e a tensão cisalhante devido aos efeitos viscosos assume o valor máximo $\tau_W = \rho.u_*^2$. Desta forma, tão logo se afasta da parede, a tensão viscosa decresce e a turbulência aumenta. Na posição $y^+ \approx 10$, estas tensões são aproximadamente iguais. Considerando que a camada limite seja dada pela Lei Exponencial ou na forma logarítmica, a tensão devido aos efeitos viscosos pode ser desprezada se comparada à tensão devido à turbulência.

Além disso, no escoamento dentro de uma camada limite, a tensão cisalhante turbulenta e a gradiente de velocidade $\partial\tilde{U}/\partial y$ são sempre, aproximadamente, opostas em sinal. Por outro lado, no caso de um jato incidente sobre a parede, estes parâmetros podem apresentar o mesmo sinal, indicando que existem outros termos mais importantes na equação (D.13) que afetam o escoamento.

Existem diferentes níveis de aproximação, que podem ser utilizadoss para resolver o "problema de fechamento" da equação D.13, destacando-se em ordem crescente de complexidade, habilidade para modelar a turbulência e ao custo computacional requerido (memória e processador utilizados pelo cálculo numérico):

a) **Modelos algébricos**: neste caso, uma equação algébrica é usada para computar a viscosidade devido ao escoamento turbulento. O tensor de Tensões de Reynolds é computado usando uma hipótese, que relaciona o

tensor de Reynolds aos gradientes de velocidade e viscosidade devido à turbulência. Esta hipótese é conhecida como Hipótese de Boussinesq;

b) **Modelos a uma Equação**: neste caso, a equação de transporte é resolvida para uma quantidade de turbulência (usualmente a energia cinética turbulenta) e uma segunda quantidade de turbulência (usualmente a escala do comprimento da turbulência) no formato algébrico usando também a Hipótese de Boussinesq;

c) **Modelos a Duas Equações**: estes modelos descrevem as equações de transporte utilizando-se duas escalas, por exemplo a energia cinética turbulenta **k** e sua dissipação **ε**. Neste caso, o tensor de tensões de Reynolds é computado usando uma hipótese a qual relaciona o tensor de tensões de Reynolds aos gradientes de velocidade e a viscosidade devido à turbulência; e

d) **Modelos de Tensões de Reynolds**: neste caso, a equação de transporte é obtida da derivação do tensor de Reynolds $\overline{u_i.u_j}$. Uma equação deve ser adicionada para determinar a escala do comprimento da turbulência. Usualmente, uma equação para a dissipação **ε** também pode ser usada. É o modelo mais complexo, podendo ter até 6 equações algébricas.

De todos os modelos citados, este trabalho contempla o desenvolvimento de um **Modelo a Duas Equações**, conhecido como **Modelo de Turbulência RNG k-ε**, a ser apresentado nos próximos itens.

D.4 Teoria de Boussinesq

Nos modelos de turbulência em que se considera o efeito viscoso na camada limiteo, ou seja, as tensões de Reynolds são funções tanto das gradientes de velocidade quanto da viscosidade turbulenta, pode-se utilizar a Teoria de Boussinesq, onde o Tensor de Tensão de Reynolds na equação de Navier Stokes média é estabelecida pela multiplicação entre a viscosidade turbulenta μ_t e os gradientes de velocidade.

Seja esta teoria aplicada ao termo de difusão no lado direito da equação D.9, considerando a seguinte identidade:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu.\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right)-\rho.\overline{u_i.u_j}\right]=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[(\mu+\mu_t).\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right)\right] \qquad (D.15)$$

A equação D.15 permite obter também a seguinte identidade:

$$\rho.\overline{u_i.u_j}=-\mu_t..\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right) \qquad (D.16)$$

Se a equação D.16 realiza uma contração (isto é, define índices **i = j**), o lado direito torna-se:

$$.\overline{u_i.u_i}\equiv 2.k \qquad (D.17)$$

Onde **k** é a energia cinética turbulenta, comparativamente à equação D.3.

Por outro lado, pela equação de continuidade D.10, o.lado direito da equação D.16 se anula no regime permenente. Desta forma, para tornar a equação D.16 valida em relação à contração (isto é, é válida a identidade **i = j**), deve-se adicionar um parâmetro definido por $2/3.\rho.\delta_{ij}.k$ no lado direito da equação D.16, tal que:

$$\rho.\overline{u_i.u_j}=-\mu_t..\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right)+\frac{2}{3}.\delta_{ij}.\rho.k \qquad (D.18)$$

Nota-se que, aplicando a contração sobre o Delta de Dirac δ_{ij}, obtem-se:

$$\delta_{ii}=\delta_{11}+\delta_{22}+\delta_{33}=1+1+1=3$$

D.5 Equações para a Energia Cinética

D.5.1. Equação Exata

A equação da energia cinética turbulenta $k=1/2.\overline{u_i.u_i}$ é obtida diretamente da equação de Navier Stokes, admitindo como hipóteses que o escoamento é em regime permanente, incompressível e de viscosidade constante, conforme equação D.9, donde se obtém:

$$\frac{\partial\left(\rho.U_i.U_j\right)}{\partial x_j}=-\frac{\partial P}{\partial x_i}+\mu.\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j^2} \qquad (D.19)$$

Além disso, considerando a equação de Navier Stokes média no tempo tem-se:

$$\frac{\partial\left(\rho.U_i.U_j\right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu.\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j^2} - \rho.\frac{\partial\left(\overline{u_i.u_j}\right)}{\partial x_j} \tag{D.20}$$

Subtraindo a Equação D.20 da equação D.19, multiplicando por $\mathbf{u_i}$ e tomando-se a média no tempo, se obtém:

$$\frac{\partial\left[\overline{\rho.Ui.Uj - \rho.\widetilde{U}i.\widetilde{U}j}\right]\overline{u_i}}{\partial x_j} = -\frac{\partial\left[\overline{P - \widetilde{P}}\right]\overline{u_i}}{\partial x_i} + \mu.\frac{\partial\left[\overline{U_i - \widetilde{U}_i}\right]\overline{u_i}}{\partial x_j^2} + \rho.\overline{\frac{\partial\left(\overline{u_i.u_j}\right)}{\partial x_j}.u_i} \tag{D.21}$$

O lado esquerdo da equação D.21 pode ser reescrito como:

$$\rho.\overline{\frac{\partial\left[\left(\widetilde{U}_i + u_i\right)\left(\widetilde{U}_j + u_j\right) - \widetilde{U}_i.\widetilde{U}_j\right]}{\partial x_j}.u_i} = \rho.\overline{\frac{\partial\left[\widetilde{U}_i.u_j + u_i.\widetilde{U}_j + u_i.u_j\right]}{\partial x_j}.u_i} \tag{D.22}$$

Usando a equação da continuidade $\partial\left(\rho.u_j\right)/\partial x_j = 0$, o primeiro termo do lado direito da equação D.22 é reescrito como:

$$\overline{\frac{\partial\left(\rho.U_i.u_j\right)}{\partial x_j}.u_i} = \rho.\overline{u_i.u_j}.\frac{\partial U_i}{\partial x_j} \tag{IV.23}$$

Do segundo termo do lado direito da equação D.22, usando a identidade $\partial\left(\rho.\widetilde{U}_j\right)/\partial x_j = 0$, resulta:

$$\overline{\frac{\partial\left(\rho.\widetilde{U}_j.k\right)}{\partial x_j}} = \widetilde{U}j.\rho.\overline{\frac{\partial\left[1/2.u_i.u_i\right]}{\partial x_j}} = \frac{1}{2}.\rho.\widetilde{U}_j.\left\{\overline{u_i.\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_i.\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}\right\} = u_i.\overline{\frac{\partial\left(\rho.\widetilde{U}_j.u_i\right)}{\partial x_j}} \tag{D.24}$$

O terceiro termo do lado direito da equação D.22, usando a mesma técnica utilizada na equação D.24, pode ser reescrito como:

$$\frac{1}{2}.\overline{\frac{\partial\left(\rho.u_j\,u_i.u_i\right)}{\partial x_j}} \tag{D.25}$$

Além disso, o primeiro termo do lado direito da equação D.21 usando a "regra do derivada de produto" pode ser dado por:

$$-\overline{\frac{\partial\widetilde{p}}{\partial x_i}.u_i} = -\frac{\partial\left(\overline{\widetilde{p}.u_i}\right)}{\partial x_i} \tag{D.26}$$

O segundo termo do lado direito da equação D.21 pode ser reescrito para:

$$\mu.\overline{\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}.u_i} = \mu\left\{\overline{\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}.u_i\right)} - \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}.\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}\right\} \tag{D.27}$$

Para o primeiro termo do lado direito da equação D.27, utilizando a mesma técnica da equação D.23, obtem-se:

$$\mu.\overline{\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}.u_i\right)} = \mu.\frac{1}{2}.\frac{\partial^2\left(\overline{u_i.u_i}\right)}{\partial x_j^2} = \mu.\frac{\partial^2 k}{\partial x_j^2} \tag{D.28}$$

O último termo no lado direito da equação D.21 é nula. Neste momento, pode-se manipular a equação de transporte para determinar a energia cinética turbulenta. Tomando-se as equações de D.23 a D.28, obtem-se:

$$\underbrace{\frac{\partial\left(\rho.\widetilde{U}_j.k\right)}{\partial x_j}}_{\text{I}} = \underbrace{-\rho.\overline{u_i.u_j}.\frac{\partial \widetilde{U}_i}{\partial x_j}}_{\text{II}} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{u_j.p} + \frac{1}{2}.\rho.\overline{u_j.u_i.u_i} - \mu.\frac{\partial k}{\partial x_j}\right]}_{\text{III}} \underbrace{-\mu.\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}.\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}}_{\text{IV}} \tag{D.29}$$

Os termos assinalados na equação D.29 apresentam os seguintes significados:

I. *Convecção*.

II. *Produção*. As grandes escalas de turbulência extraem energia do escoamento. Este termo (incluindo o sinal de menos) é sempre positivo;

III. Os dois primeiros termos representam a *difusão turbulenta* dada, respectivamente, pelas flutuações da pressão e velocidade. O último termo representa a difusão viscosa;

IV. *Dissipação*.Este termo é responsável pela transformação da energia cinética nas pequenas escalas em energia interna. O termo (incluindo o sinal menos) é sempre negativo.

No escoamento na camada limite, a equação exata para **k** é dada por:

$$\frac{\partial\left(\rho.U.k\right)}{\partial x} + \frac{\partial\left(\rho.V.k\right)}{\partial y} = -\rho.\overline{u.v}.\frac{\partial U}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{p.v} + \frac{1}{2}.\overline{\rho.v.u_i.u_i} - \mu.\frac{\partial k}{\partial y}\right] - \mu.\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}.\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \tag{D.30}$$

Nota-se que a dissipação inclui todas as derivadas, porque o termo de dissipação abrange todas as escalas de turbulência, assumindo que o meio é isotrópico, onde a usual aproximação de camada limite $\partial u_i/\partial x << \partial u_i/\partial y$ não é válida.

D.5.2. Modelo da Equação

Na equação D.29, identifica-se que existem incógnitas, principalmente no termo de produção, no termo de difusão turbulenta e no termo de dissipação.

No termo de produção, por exemplo, a incógnita é o tensor de tensão. Desde que se tenha uma expressão apropriada que pode ser usada na equação de Navier Stokes, pode-se aplicar a mesma expressão para obter este termo de produção. Por exemplo, a equação D.17 inserida no termo de produção (termo II) na equação D.29 permite obter a seguinte equação:

$$P_k = -\rho.\overline{u_i.u_j}.\frac{\partial \tilde{U}i}{\partial x_j} = \mu_t.\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right).\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3}.\rho.k.\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_i} \qquad (D.31)$$

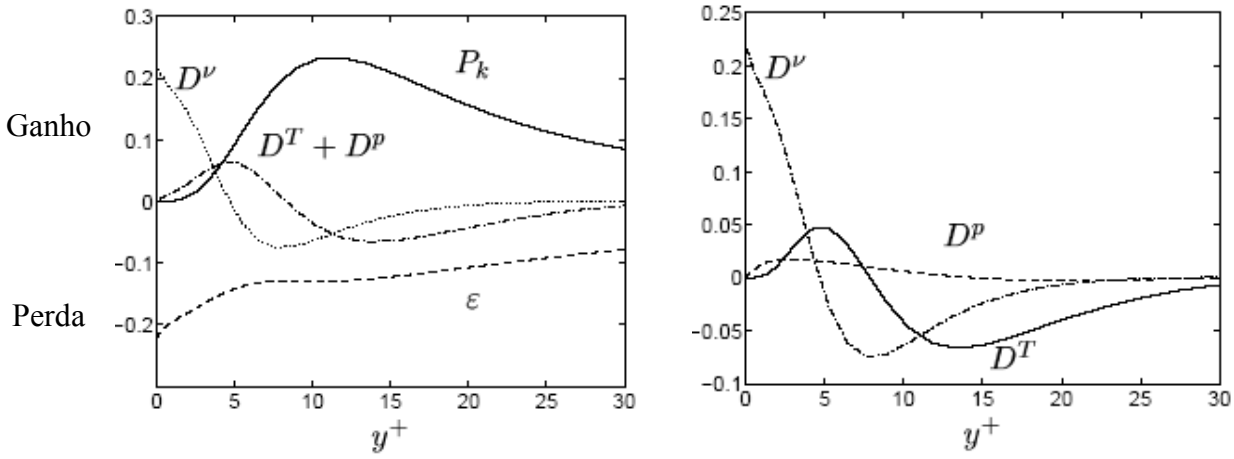
Nota-se que o último termo na equação D.31 é nula para escoamento incompressível devido à equação de continuidade D.9.

Os termos da parte III na equação D.28 são modelados usando a Lei de Gradiente, onde é assumido que **k** é a difusão inferior do gradiente, isto é, da região de alto valor de **k** para regiões com baixo valor de **k** (conforme a Lei de Fourier para o fluxo de calor, onde o calor é transferido por condução das regiões quentes para as regiões frias). Desta forma, obtem-se:

$$\frac{1}{2}.\overline{\rho.u_j.u_i.u_i} = -\frac{\mu_t}{\sigma_k}.k_j \qquad (D.32)$$

Onde $\boldsymbol{\sigma_k}$ é o numero de Prandtl turbulento para **k**. É importante frisar que não existe nenhum modelo para o termo da difusão – pressão na equação D.29.

A ordem de grandeza deste termo é pequeno, conforme é verificado na Fig. D.3, onde são apresentadas as curvas características referentes ao balanço de energia na equação **k** para um escoamento entre superfícies planas paralelas com distância adimensional $\mathbf{y^+}$, com número de Reynolds igual a 7890: termo produção $\mathbf{P_k}$; dissipação $\boldsymbol{\varepsilon}$; difusão turbulenta (pela tripla correlação entre velocidade e pressão) $\mathbf{D^T + D^P}$; e difusão viscosa $\mathbf{D^\nu}$.



(a) (b)

Figura D. 3 Balanço de energia na equação k para um escoamento entre superfícies planas paralelas com distância adimensional y+: (a) Comparativo com relação ao termo de dissipação ε; (b) Comparativo com relação ao termo difusão viscosa, Davidxon (2003)

Nota-se da Fig. D.3 que o termo da difusão – pressão ($\mathbf{D^T + D^P}$) na equação D.29 pode ser desprezado, porque a sua ordem de grandeza é menor do que 0,1 e menor do que 0,07 quando $\mathbf{D^T}$ e $\mathbf{D^P}$ são analisados separadamente.

Por outro lado, o termo de dissipação na equação D.29 pode ser estimado considerando o conceito de dissipação da energia por efeito cascata, conforme explicado pelo item D.3. Por este conceito, a dissipação da energia em grandes escalas no decorrer do tempo, o qual é proporcional a razão entre a escala de turbulência **L** e a escala de velocidade do escoamento **U**, pode ser dada pela seguinte proporcionalidade:

$$\varepsilon = O\left(\frac{U^2}{L/U}\right) = O\left(\frac{U^3}{L}\right)$$

Consequentemente, a escala de velocidade pode assumir o seguinte formato:

$$U = \sqrt{k} \tag{D.33}$$

Desta forma, tem-se ainda:

$$\varepsilon \equiv \sqrt{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}.\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} = \frac{k^{3/2}}{L} \tag{D.34}$$

Considerando a modelagem adotada anteriormente, a equação de **k** pode ser desenvolvida como segue:

$$\frac{\partial\left(\rho.\widetilde{U}_j.k\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right).\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] + P_k - \rho.\frac{k^{3/2}}{L} \tag{D.35}$$

Nota-se da equação D.35 que existe uma constante σ_k no termo de difusão turbulenta, a qual será determinada em item posterior.

O termo de dissipação contem uma outra quantidade incógnita, representada pela escala do comprimento da turbulência **L**. Neste caso, é necessária uma adicional equação de transporte.

No modelo de turbulência **RNG k-ε**, por exemplo, onde **ε** é obtida a partir de sua própria equação de transporte, o termo de dissipação $\rho.k^{3/2}/L$ na equação D.35 é simplesmente representado pelo produto **ρ. E**.

Para o escoamento na camada limite, a equação D.35 assume o seguinte formato:

$$\frac{\partial(\rho.U.k)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho.V.k)}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)..\frac{\partial k}{\partial y}\right]+\mu_t.\left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)^2-\rho.\frac{k^{3/2}}{L} \qquad (D.36)$$

D.6 Modelo de Turbulência à Duas Equações

D.6.1. Modelo da Equação para ε

Uma equação exata para a dissipação **ε** pode ser derivada da equação de Navier Stokes, todavia, o número de incógnitas é muito grande e envolve duplas correlações entre as flutuações de velocidade e gradientes de flutuação pressão-velocidade (acoplamento pressão velocidade).

A melhor solução é obter **ε** a partir de testes experimentais. Na equação exata de **ε**, o termo de produção inclui, tal como a equação de **k**, quantidades relativas à turbulência e aos gradientes de velocidade.

Por exemplo, caso se deseje incluir o produto $\overline{u_i.u_j}$ e a gradiente $\partial U_i/\partial x_j$ no termo de produção e, somente as quantidades relativas à turbulência no termo de dissipação sejam consideradas, observando a equação D.29 para **k**, tem-se:

$$P_\varepsilon=-c_{\varepsilon 1}.\frac{\varepsilon}{k}.\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i}\right).\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \qquad (D.37.a)$$

$$\text{Termo de Disipação}=-c_{\varepsilon 2}.\rho.\frac{\varepsilon^2}{k} \qquad (D.37.b)$$

Onde $\mathbf{c_{\varepsilon 1}}$ e $\mathbf{c_{\varepsilon 2}}$ são constantes de proporcionalidade. Nota-se que o termo de produção apresenta a proporcionalidade $P_\varepsilon = c_{\varepsilon 1}.(\varepsilon/k).P_k$.

Desta forma, pode-se escrever a equação de transporte para a dissipação como segue:

$$\frac{\partial\left(\rho.\tilde{U}_j.\varepsilon\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right).\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] + \frac{\varepsilon}{k}.\left(c_{\varepsilon 1}.P_k - c_{\varepsilon 2}.\rho.\varepsilon\right) \qquad (D.38)$$

Para o escoamento na camada limite, a equação D.38 assume o seguinte formato:

$$\frac{\partial(\rho.U.\varepsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho.V.\varepsilon)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)..\frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\right] + c_{\varepsilon 1}.\frac{\varepsilon}{k}.\mu_t.\left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)^2 - \rho.c_{\varepsilon 2}.\frac{\varepsilon^2}{k} \qquad (D.39)$$

D.6.2. Modelo de Turbulência RNG k-ε

Este modelo de turbulência resolve as equações de transporte para **k** e **ε** dadas pelas equações D.29 e D.38, respectivamente. Consiste em uma renormalização das equações de Navier Stokes, utilizando como parâmetro o comprimento da escala de turbulência, **L**.

Considerando a escala ou comprimento de turbulência dada pela equação D.28, tem-se:

$$L = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \qquad (D.40)$$

A viscosidade turbulenta pode ser computada por:

$$\nu_t = c_\mu.k^{1/2} = c_\mu.\frac{\kappa^2}{\varepsilon} \qquad (ID.41)$$

Considerando as equações D.40 e D.41, junto com as equações D.29 e D.38, existem cinco incógnitas ($\mathbf{c_\mu}$, $\mathbf{c_{\varepsilon 1}}$, $\mathbf{c_{\varepsilon 2}}$, $\boldsymbol{\sigma_k}$ e $\boldsymbol{\sigma_\varepsilon}$) que devem ser aplicáveis em todos os tipos de escoamentos.

Os escoamentos simples são selecionados, onde a equação pode ser simplificada e onde as informações experimentais são usadas para determinar estas constantes.

- **Constante $\mathbf{c_\mu}$**

A constante $\mathbf{c_\mu}$ é determinada segundo os efeitos viscosos atuantes no escoamento. Como visto anteriormente, a tensão cisalhante turbulenta na parede (Fig. D.1) desaparece com as projeções da velocidade u = v = 0, e a tensão cisalhante devido aos efeitos viscosos assume o valor máximo $\tau_W = \rho.u_*^2$. Desta forma, tal logo se aproxima da parede, a tensão viscosa

aumenta e a turbulência diminui. Este comportamento pode ser associado à Função Parede ou Efeito Camada Limite.

Na camada limite com escoamento turbulento desenvolvido (**30 < y^+ < 100**), o termo de produção e o termo dissipação na equação de transporte são muito maiores do que os outros termos, conforme mostra a Fig. D.4 sobre o balanço na equação **k**, considerando número de Reynolds igual a 4400 para o escoamento na camada limite ao longo de uma placa plana.

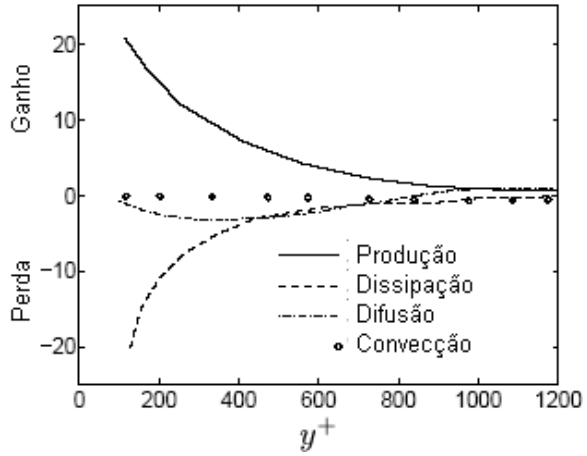


Figura D. 4 Balanço da equação k sobre a camada limite ao longo de uma placa plana

Considerando a Lei Logarítmica, pode-se escrever a proporção entre a velocidade do escoamento **U** numa dada posição **y** na camada limite em relação à velocidade do escoamento $\mathbf{u_o}$ antes da placa plana, conforme a seguinte equação:

$$\frac{U}{u_o} = \frac{1}{\kappa}.\ln\left(\rho.\frac{u_o}{\nu}.y\right) \qquad (D.42)$$

Analogamente, a equação **k** modelada [Equação D.30] escrita segundo a Lei Logarítmica se transforma na seguinte expressão:

$$0 = \mu_t.\left(\frac{\partial \upsilon}{\partial y}\right)^2 - \rho.\varepsilon \qquad (D.43)$$

Onde se pode distinguir o termo dissipação $\rho.k^{3/2}/L$ por $\rho.\varepsilon$.

Na região definida pela Lei Logarítmica, a tensão cisalhante $-\rho.\overline{u.v}$ é igual a tensão cisalhante na parede $\boldsymbol{\tau_w}$, conforme mostra Fig. D.2.

Nestas condições, a **Teoria de Boussinesq** para a tensão cisalhante assume o seguinte formato, conforme a equação D.17:

$$\tau w = -\rho.\overline{u.v} = \mu_t.\frac{\partial\ \tilde{U}}{\partial\ y} \qquad (D.44)$$

Usando a definição da Tensão Cisalhante na Parede $\tau_W = \rho.u_*^2$ e inserindo as equações D.41 e D.44 na equação D.43, obtém-se o valor da constante $\mathbf{c_\mu}$, resultando na seguinte equação:

$$c_\mu = \left(\frac{u_*^2}{k} \right)^2 \qquad (D.44)$$

Dos dados experimentais, tem-se $u_*^2 / k = 0{,}292 \pm 0{,}016$ tal que $c_\mu = 0{,}085 \pm 0{,}009$.

- **Constante $c_{\varepsilon 1}$**

A constante $\mathbf{c_{\varepsilon 1}}$ é determinada de maneira similar à constante $\mathbf{c_\mu}$, conforme Yakhot e Orszag (1986):

$$c_{\varepsilon 1} = 1{,}42 - \frac{\eta . \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0} \right)}{1 + \beta . \eta^3} \qquad (D.45)$$

Onde os parâmetros η, η_0, e β possuem os seguintes valores:

$$\eta = \left(\frac{k}{\varepsilon} \right) . (2 . S_{IJ} . S_{IJ})^{1/2} \qquad (D.46)$$

$$\eta_0 = 4.38$$

$$\beta = 0.015$$

Dos dados experimentais, tem-se $c_{\varepsilon 1} = 1{,}50 \pm 0{,}05$.

- **Constante $c_{\varepsilon 2}$**

O escoamento existente atrás de uma esteira (vórtices de Von Karmann) gerados por corpos imersos no escoamento pode ser considerado um escoamento simples, o que permite determinar a constante $\mathbf{c_{\varepsilon 2}}$.

Nesta região, as gradientes de velocidade são muito pequenas, significando que o termo $\mathbf{P_k}$ é, aproximadamente, nulo. Portanto, para velocidade V = 0 e considerando que os termos de difusão sejam desprezados, as equações de **k** e **ε** modeladas [equações D.28 e D.38, respectivamente], podem ser reescritas para as seguintes expressões:

$$\rho . \tilde{U} . \frac{dk}{dx} = -\rho . \varepsilon \qquad (D.47)$$

$$\rho . \tilde{U} . \frac{d\varepsilon}{dx} = -c_{\varepsilon 2} .. \rho . \frac{\varepsilon^2}{k} \qquad (D.48)$$

Considerando que o decaimento de **k** é exponencial segundo a proporção $k \propto x^{-m}$, a equação D.45 fornece a proporção $k \propto -m.x^{-m-1}$. Inserindo esta proporcionalidade na equação D.45, derivando para encontrar $d\varepsilon/dx$ e inserir a mesma na equação D.48, resulta:

$$c_{\varepsilon 2} = \frac{m+1}{m} \qquad (D.49)$$

Dados experimentais fornecem $m = 1{,}57 \pm 0{,}39$ tal que $c_{\varepsilon 2} = 1{,}68 \pm 0{,}17$.

- **Constante σ_k e σ_ε**

As constantes σ_k e σ_ε são determinadas experimentalmente para vários modelos de escoamentos básicos, tais como escoamentos em canais, tubos, jatos, ondas, entre outros.

Dados experimentais fornecem $\sigma_k = 0{,}72 \pm 0{,}11$ e $\sigma_\varepsilon = 0{,}72 \pm 0{,}07$, conforme Yakhot e Orszag (1986).

De forma geral, o modelo de turbulência RNG k-ε apresenta vantagens em relação ao um outro modelo de turbulência à duas equações, conhecido como Modelo **k-ε**, as quais são:

a) Capacidade para rastrear as menores vorticidades junto com as vorticidades de maior intensidade, que apareçam no escoamento turbulento;

b) Possui robustez numérica para obter maior precisão nos resultados; e

c) Sua convergência numérica tende a ser mais rápida (ou seja, menor número de iterações para um mesmo erro alvo referenciado).

Por outro lado, tal como todos os outros modelos numéricos, este modelo de turbulência também possui limitações. Estas limitações são inerentes ao modelo à duas equações quando comparado ao modelo à uma equação, com destaque para:

a) Não é apropriado para simular o escoamento em subcamada limite onde os efeitos da viscosidade são predominantes; e

b) Ainda é necessário fazer hipóteses simplificadoras.

Desta forma, outros modelos de turbulência são implementados a fim de melhor representar o comportamento do escoamento turbulento para diferentes fluidos de trabalho, com destaque para o SST, RSM, Sparlat-Almaras, que podem ser estudados em detalhes nos trabalhos implementados por Bardine *et al* (1997), Clarke e Wilkers (1989) e Sparlart *et al* (1997), respectivamente.

Apêndice E

EQUACIONAMENTO DE UM MODELO DE COMBUSTÃO

E.1 Generalidades

A modelagem da combustão, ou qualquer outro fenomeno físico, pode ser simulado pela Dinâmica de Fluidos Computacional utilizando três técnicas básicas:

- *RANS ("Reynolds Averaged Navier Stokes")* tem sido historicamente a primeira metodologia para a solução das equações de transporte de massa, quantidade de movimento e energia possível, porque o cálculo para cada instante de tempo para a chama com escoamento turbulento era impossível. Desta forma, a RANS foi desenvolvida para encontrar a solução da equação de Navier Stokes dada em função dos valores médios de pressão, velocidade e temperatura, desprezando os efeitos da compressibilidade. As equações são escritas num formato que permita o cálculo simultâneo das variáveis num mesmo passo de tempo, o que permite caracterizar a dinâmica do escoamento e da combustão em função das espécies químicas da mistura e do fluxo de calor (ver equações 3.1, 3.2 e 3.3). Resolvendo estas equações, providenciam-se os valores médios de pressão, velocidade e temperatura em relação ao tempo. Esta formulação também é conhecida como *Método de Média Ponderada de Favre*. A Figura E.1 mostra o comportamento da temperatura em relação ao tempo obtida pela RANS. No caso de chamas estáveis, a temperatura calculada pela RANS para um dado ponto é uma constante que corresponde à temperatura média

ponderada, calculada em relação á área ou ao volume ocupado pelos elementos constituintes de uma malha que interceptam este ponto;

- LES (“*Large Eddy Simulation*”) é aplicada para descrever altas escalas de turbulência de forma explicita, considerando também os efeitos das menores escalas de turbulência. Por esta técnica, uma função do tipo logaritmo é aplicada às equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia (equações 3.1, 3.2 e 3.3) atuando como um filtro, ou seja, permite minimizar as variações nos valores de pressão, velocidade e temperatura. Esta formulação também é conhecida como *Método de Filtro de Favre*.A Figura E.1 mostra também o comportamento da temperatura em relação ao tempo pela LES. No caso das chamas com altas escalas de turbulência, esta técnica pode rastrear as variações de baixa freqüência na distribuição de temperatura, como mostra a Fig. E.2; e
- DNS (“*Direct Numerical Simulation*”) é onde as equações de Navier Stokes calculadas num instante **t** (que consideram a variação estatística da pressão, velocidade e temperatura na forma geral $u = \bar{u} \pm u_t$) são resolvidas sem necessitar de um modelo de escoamento turbulento específico. Nesta técnica, todas as escalas de turbulência são explicitamente determinadas, bem como seus efeitos na combustão. A DNS permite prever todas as variações da temperatura no tempo, por exemplo, conforme mostra a Fig. E.1, exatamente como um instrumento de alta resolução utilizado em testes experimentais. Esta técnica foi implementada nos últimos 30 anos graças ao desenvolvimento de computadores com alto desempenho, o que tem contribuindo para a obtenção de resultados mais precisos na combustão com escoamento turbulento, porém sua aplicação ainda é limitada aos modelos de turbulência acadêmicos, especialmente, nos casos práticos analisando a combustão em pequenas cavidades cúbicas.

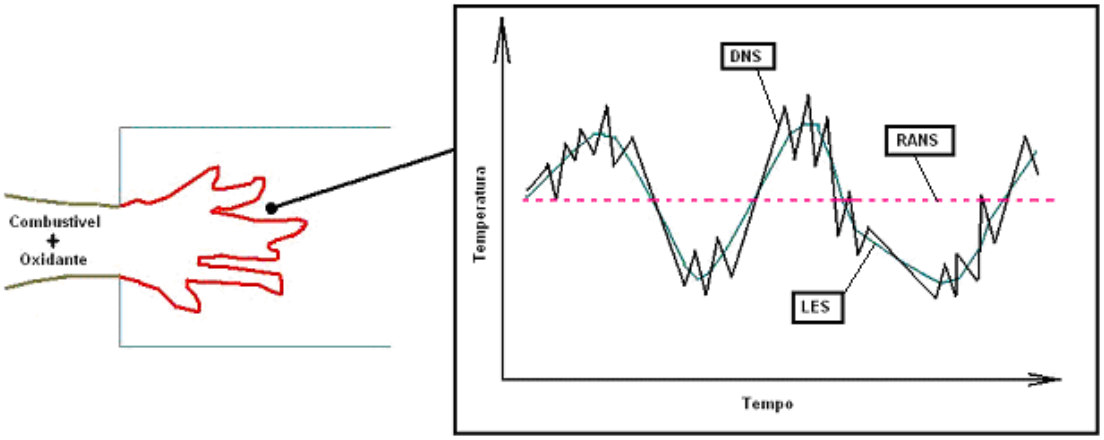


Figura E. 1 Curvas características referentes ã evolução da temperatura computada com as técnicas RANS, DNS e LES para chama com escoamento turbulenta, Poinsot e Veynante (2005)

As propriedades das técnicas RANS, DNS e LES são resumidas em função do espectro da energia dissipada pela turbulência, conforme a Fig. E.2.

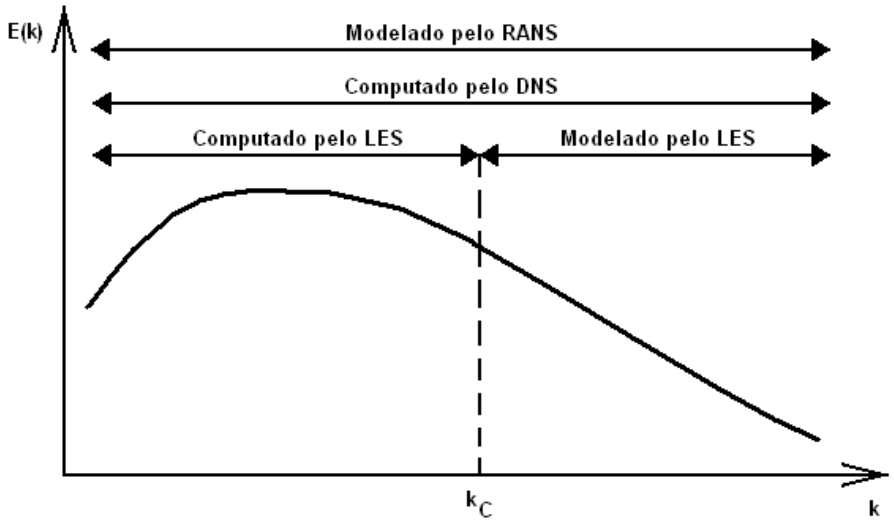


Figura E. 2 Espectro de energia dissipada pela turbulência em função da intensidade da turbulência k para as técnicas RANS, DNS e LES para chama com escoamento turbulenta, utilizando escala di-log, Poinsot e Veynante (2005)

Da figura E.2, todas as freqüências no espectro são resolvidas numericamente, visto que as maiores freqüências (acima da intensidade limite de turbulência para modelagem, **kc**) são abordadas pela técnica LES (os efeitos dos escoamentos com intensidades maiores do que a intensidade **kc** são modelados por extrapolação). Na técnica RANS, somente os escoamentos com intensidade média de turbulência **k** são analisados, onde nenhum movimento turbulento é explicitamente rastreado.

Sob o aspecto da simulação realizada em CFD para escoamentos com ou sem reação, a modelagem apresenta as seguintes características:

a) a técnica DNS é mais aplicada em modelagens acadêmicas envolvendo escoamentos com baixos números de Reynolds (**Re < 100**) e simples geometrias, utilizando menores escalas de tamanho de elemento;

b) a técnica LES trabalha com malhas com grandes elementos, sendo apropriada para estudos envolvendo altas escalas, porém, pode ser aplicada em escoamentos com altos números de Reynolds (**Re > 10^4**), desde que a malha apresente menor escala de tamanho de elementos, a fim de garantir precisão satisfatória com maior custo computacional; e

c) a técnica RANS é a mais aplicada na engenharia, porque requer menor quantidade de dados para a simulação, todavia, sua validação é limitada a modelos geométricos particulares para descrição da turbulência e da combustão. Abrange geometrias mais simples de escalas geométricas diversas.

Na tabela E.1, apresentam-se aspectos positivos e negativos referentes às três técnicas de aproximação de escoamentos turbulentos em geral, que podem ser aplicadas ao caso de análise da combustão.

Tabela E. 1 Comparação entre as técnicas RANS, DNS e LES sob o aspecto das simulações numéricas da combustão com escoamento turbulento, Peters (2000)

Técnica de aproximação	Aspectos Positivos	Aspectos Negativos
RANS	1. Malha com elementos maiores; 2. Menor custo Computacional; e 3. Geometrias simples.	1. Uso exclusivo para escoamentos com valores médios; e 2. Requer modelos.
LES	1. Características em regime não permanente; e 2. Menor impacto de modelagem do que RANS.	1. Requer modelos; 2. Requer simulação 3D; 3. Necessita códigos precisos; e 4. Alto custo computacional.
DNS	1. Nenhum modelo necessita de interação entre turbulência e combustão; e 2. Ferramenta para estudar modelos.	1. Custo numérico proibitivo (malhas com elementos pequenos, códigos precisos); e 2. Limitado à problemas acadêmicos.

Existe uma metodologia híbrida que reúne as características do LES e do RANS conhecida por DES ou "Detached Eddy Simulation Model", baseado no trabalho de Sparlat *et al* (1997). Enquanto o RANS descretiza o escoamento global, o LES ajuda a discretizar o escoamento em cavidades onde os efeitos compressíveis podem aparecer. É um método restrito às geometrias 2D em estudos acadêmicos, Chung (2000).

Entre os modelos de combustão disponíveis em CFD, o ***Eddy Brak-Up*** (**EBU**) ou ***Eddy Dissipation Model*** (**EDM**) trata-se de uma aplicação da técnica RANS para chamas com pré-mistura entre ar e combustivel em regime de escoamento turbulento, Peters (2000).

No próximo item, o equacionamento deste modelo de combustão é detalhado.

E.2 Modelo EBU ("Eddy Break Up") ou EDM ("Eddy Dissipation Model")

O modelo de combustão EBU ou EDM consiste em analisar a combustão com escoamento turbulento para altos Números de Reynolds. Este modelo considera os efeitos químicos implicitamente e os efeitos da turbulência na taxa de reação. É um modelo de combustão encontrado em todos os softwares comerciais de CFD devido à sua robustez numérica, estabilidade do cálculo e convergência rápida.

Este modelo assume que as reações sejam completas no momento da mistura, tal que a taxa de reação seja controlada pela mistura turbulenta, conforme Lefebvre e Reid (1966). Desta forma, este modelo possui uma ampla faixa de aplicação, podendo prever as distribuições de temperatura e até as concentrações das espécies químicas nos produtos da combustão.

Por este modelo, a combustão pode ser descrita por uma reação química global de uma etapa dada na forma:

$$F + vs.\ O \rightarrow (1 + vs).P \qquad (E.1)$$

Na equação E.1, **F** refere-se ao combustível, **O** ao oxidante, **P** aos produtos da reação, e **vs** é o coeficiente estequiométrico.

Alternativamente, para um esquema formado por múltiplas etapas, cada espécie química tem sua própria taxa de reação, cujo valor pode ser dado por:

$$\overline{\omega}_F = A.\frac{\varepsilon}{k}.\text{mínimo}\left[\overline{C}_F, \frac{\overline{C}_O}{\nu}, B.\frac{\overline{C}_P}{1+\upsilon}\right] \qquad (E.2)$$

Onde $\overline{C}$ denota a concentração média do combustível, do oxidante e dos produtos, respectivamente; **A** e **B** são constantes do modelo com valores típicos de 0.5 e 4, respectivamente.

Os valores destas constantes são obtidos por testes experimentais e são aplicáveis em muitos casos. Contudo, deve ficar claro que isto representa uma limitação deste modelo, uma vez que existem casos que o mesmo não se aplica, principalmente, nas simulações que as reações moleculares são mais importantes ou que a chama produzida pela combustão se realize isenta de pré-mistura.

Desta forma, deve-se sempre ter certo cuidado no uso deste modelo especialmente em regiões onde a turbulência seja muito intensa, onde a taxa de **k** para **ε** seja grande (por exemplo, na frente das ondas da chama provocadas por Swirlers em câmaras de combustão do tipo tubular), ou em regiões onde a chama se origina por detonação e/ou explosão, como nos motores de combustão interna.

No caso particular do modelo EDM ou EBU, a taxa de reação média pode ser dada como uma função do tempo característico da mistura com escoamento turbulento $\boldsymbol{\tau_t}$ e das flutuações de temperatura reduzida $\widetilde{\Theta}^2$, sendo dada pela equação:

$$\dot{\omega}_{\widetilde{\Theta}} = C.\overline{\rho}.\frac{\sqrt{\widetilde{\Theta}^2}}{\tau_t} \qquad (E.3)$$

Onde **C** é uma constante do modelo da ordem de uma unidade; $\tilde{\rho}$ é a massa especifica média na mistura; $\tilde{\Theta}$ é a Temperatura Reduzida e dada pela equação:

$$\Theta = \frac{Cp.(T - T_1)}{Q.Y_F^1} \tag{E.4}$$

Onde **T** é a temperatura da chama; $\mathbf{T_1}$ é a temperatura do combustível antes da mistura; **Cp** é o calor espcifico do combustível à pressão constante; e **Q** é a quantidade de calor liberada pela combustão completa de certa quantidade em número de moles do combustível; Y_F^1 refere-se a fração mássica do combustível que não sofreu combustão, utilizada também para definir fração mássica reduxida **Y** dada pela equação:

$$Y = \frac{Y_F}{Y_F^1} \tag{E.5}$$

Onde Y_F é a fração mássica de combustível presente na combustão.

No caso particuar da modelagem da combustão, considerando que a pressão seja constante e as paredes do local de formação da chama sejam adiabáticas, a temperatura reduzida **Θ** e a fração mássica reduzida dos reagentes **Y**, se relacionam pela identidade, Kuo (1986):

$$\Theta + Y = 1 \tag{E.6}$$

Caso as paredes não fossem adiabáticas, a equação E.6 assume um novo formato a fim de caracterizar misturas gasosas reativas, dado pela equação:

$$\Phi = Y.\ \Theta n \tag{E.7}$$

Onde **n** é um expoente obtido experimentalmente e varia entre 6 a 15, conforme Wiilians (1985).

Por outro lado, o tempo de mistura num escoamento turbulento $\boldsymbol{\tau_t}$ na equação E.3 é estimado a partir da energia cinética turbulenta **k** e de sua taxa de dissipação **ε** conforme a seguinte equação, conforme a **Análise Kolmogorov-Petrovski-Piskunov** ou **Téoria KPP**, Poinsot e Veynante (2005):

$$\tau = \frac{k}{\varepsilon} \tag{E.8}$$

A equação E.8 representa um tempo característico da chama dado na forma integral, em função da escala de turbulência. Desta forma, é usual efetuar a modelagem da combustão pelo EBU utilizando o modelo de turbulância RNG k-ε.

Contudo, o tempo químico característico da chama com escoamento turbulento também pode ser modelada usando o **Tempo de Kolmogorov**:

$$\tau = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \tag{E.9}$$

A equação E.9 representa um tempo característico da chama em função da viscosidade cinemática. Esta forma é apropriada para analises de chamas, onde o efeito viscoso se faz também importante, como no caso particular das chamas difusivas ou não pré misturadas.

Para o caso de chamas pré-misturadas, o modelo EBU necessita da estimativa das flutuações na temperatura redusiza $\widetilde{\Theta}^2$. Uma primeira análise assume que a chama seja infinitamente fina, o que acarreta, segundo Chung (2000):

$$\rho.\widetilde{\Theta}^{"2} = \overline{\rho.\left(\Theta - \widetilde{\Theta}\right)^2} = \overline{\rho}.\left(\widetilde{\Theta}^{"2} - \widetilde{\Theta}^2\right) = \overline{\rho}.\widetilde{\Theta}.\left(1 - \widetilde{\Theta}\right) \tag{E.10}$$

A equação E.10 é dada com este formato, porque a temperatura somente pode assumir dois formatos, **Θ = 0** (nos gases não queimados) ou **Θ = 1** (gases completamente queimados), tal que $\widetilde{\Theta}^2 = \Theta$.

O modelo EBU na taxa de reação média pode ser dado pela equação:

$$\dot{\omega}_{\widetilde{\Theta}} = C.\overline{\rho}.\frac{\varepsilon}{k}.\widetilde{\Theta}.\left(1 - \widetilde{\Theta}\right) \tag{E.11}$$

Nota-se que a comparação entre as equações E.3 e E.11 revela uma "incompatibilidade", pois aparentemente a raiz quadrada da equação E.3 não aparece na equação E.11.

Nesye ponto, deve-se ter certa acuidade com relação ao significado da raiz qaudrada $\sqrt{\widetilde{\Theta}^2}$, que foi introduzida pela equação E.3. Esta raiz representa inicialmente uma conveniência de cálculo com a finalidade de "dimensionalizar" o efeito da geometria da câmara de combustão no comportamento da chama, porém conduz a vários problemas físicos e matemáticos.

Uma forma de avaliar estes problemas é reaplicar aqui os conceitos definidos pela **Análise Kolmogorov-Petrovski-Piskunov** ou **Téoria KPP**. Segundo esta teoria, pode-se admitir que a turbulência não é afetada pela combustão, Peters (2000).

Desta forma, esta análise mostra que um modelo apropriado para resolver a "incompatibilidade" entre as equações E.3 e E.11, deve ter uma derivada finita dada por $d\,\overline{\dot{\omega}_\Theta}/d\,\widetilde{\Theta}$ para $\widetilde{\Theta} = 1$, para os gases completamente queimados.

Isto não é o caso quando a taxa média de reação é escrita na forma $\left[\widetilde{\Theta}.\left(1-\widetilde{\Theta}\right)\right]^{1/2}$, tal que a expressão $\widetilde{\Theta}.\left(1-\widetilde{\Theta}\right)$ pode ser mantida.

Apesar destes empecilhos, o modelo de combustão EDM ou EBU ainda possui certa atratividade em muitas aplicações, porque a taxa de reação pode ser dada por um sistema linear de equações, que representam as reações químicas com uma, duas ou mais etapas. Neste caso, não há necessidade de adicionar mais equações de transporte, como pode ocorrer em outros modelos de combustão.

Apesar do seu sucesso, o modelo EBU possui uma limitação facilmente identificável: não inclue quaisquer efeitos da cinética química. A constante **B** ou a temperatura de ativação **Ta** qua aparecem na **Taxa de Reação de Arrheniuss** estão omissas. Basta comparar com a definição dada pela seguinte equação, segundo Peters (2000):

$$\dot{\omega}_F = B.\rho.Y_F.\exp\left(-\frac{Ta}{T}\right) \tag{E.12}$$

No entanto, o modelo EBU geralmente é capaz de fornecer melhores resultados do que o próprio **Modelo de Arrhenius**, cuja equação base é, Poinsot e Veynante (2005):

$$\overline{\dot{\omega}}_\Theta = \dot{\omega}_\Theta(\widetilde{\Theta}) = -B.\overline{\rho}..\left(1-\widetilde{\Theta}\right).\exp\left(-\frac{Ta}{T_1+(T_2-T_1).\widetilde{\Theta}}\right) \tag{E.13}$$

Onde $\mathbf{T_1}$ refere-se à temperatura do gás antes da mistura; $\mathbf{T_2}$ refere-se à temperatura do gás após a mistura.

A Figura E.3 compara as variações das taxas médias de reação previstas, tanto pelo modelo EBU, quanto pelo Modelo de Arrhenius.

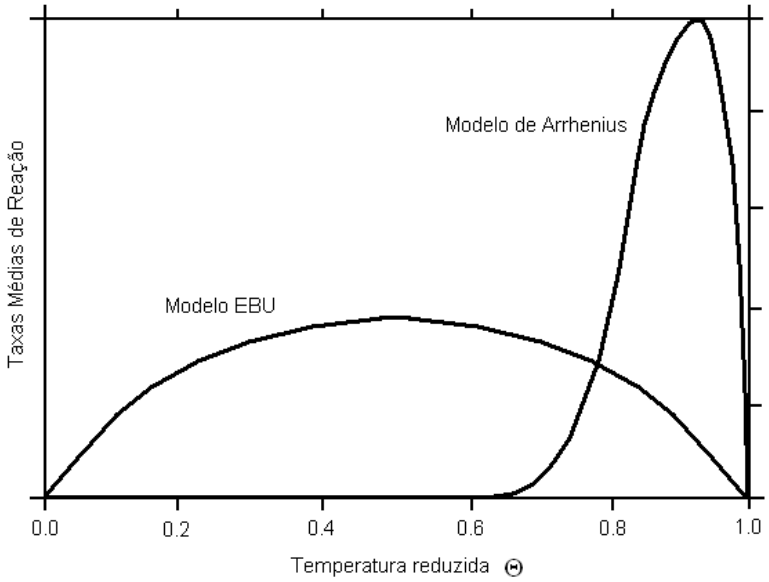


Figura E. 3 Comparação entre o modelo EBU com o Modelo de Arrhenius para chamas pré-misturadas com escoamento turbulento, Peters (2000)

O modelo de Arrhenius é relevante somente quando as escalas de tempo químico são maiores do que as escalas do escoamento turbulento ($\tau_c >> \tau_t$), com baixo **Número de Dankholer**. Neste modelo, portanto, admite-se que os reagentes se misturam rapidamente e queimam lentamente. Desta forma, este modelo é útil em aplicações envolvendo combustão diretamente na atmosfera.

E.3 Equação de Kuramoto-Sivashinski

Segundo Ariolli e Koch (2003), a caracterização do comportamento da chama produzida por câmaras de combustão, utilizando a Dinâmica de Fluidos Computacional pode ser efetuada através do levantamento do campo de variáveis aerodinâmicas junto com o termo fonte na equação de espécies (isto é, reação química, ver equação 3.1), segundo a **Equação de Kuramoto-Sivashinski**, que é representada pela seguinte equação parabólica:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 4.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \alpha.\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2.u..\frac{\partial u}{\partial x}\right) = 0, \quad u(t,0) = u(t,\pi) = 0, \quad \text{para } x \in [o,\pi] \tag{E.14}$$

Onde **u** é a velocidade do escoamento na chama.

Segundo Ariolli e Koch (2003), o atual conceito desta equação se deve aos trabalhos de Kuramoto e Sivashinsky.

Segundo Kuramoto, esta equação é útil para a análise do efeito da turbulência em sistemas com dissipação massa e calor a partir de uma chama não pré-misturada para um dado equiíbrio térmico inicial da mistura ignitável ar / combustível.

Por outro lado, Sivashinsky confirma que esta equação é útil também para a análise de chamas com escoamento laminar sob condições de instabilidade aerodinâmica para um dado modelo térmico de chamas não pré-misturadas.

Em sintese, a equação E.11 é uma forma alternativa para reescrever a equação de conservação das espécies, a fim de determinar o termo ω_k para as espécies **k** (ver equação 3.1).

Apêndice F

EQUACIONAMENTO DO PROCESSO DE COMBUSTÃO

Nesta seção, apresentam-se as variáveis físicas e equações diferenciais empregadas no estudo de processos de combustão.

F.1 Definição dos Parâmetros Básicos para Reações de Combustão

Segundo Williams (1985), Kuo (1986) e Poinsot e Veynante (2005), o processo de combustão deve ser estudado sob o aspecto de uma mistura de **k** espécies químicas diferentes, cada uma interagindo com as demais, em função de sua natureza reativa e das condições em que se realiza o processo de combustão.

As aproximações matemáticas empregadas para descrever o comportamento do escoamento e da transferência de calor num processo de combustão podem ser descritas por equações diferenciais quanto a amassa, quantidade de movimento e energia.

As variáveis utilizadas nestas aproximações matemáticas devem ser definidas de maneira que possam caracterizar fluídis multi-componentes (misturas ar, combustível e gases produtos da combustão), reações químicas, escoamentos turbulentos, transferência de calor por radiação e convecção e emissões.

A seguir, apresentam-se as principais variáveis envolvidas e no próximo item, o desenvolvimento das equações diferenciais de massa, quantidade de movimento e energia de forma generalizada, que podem ser utilizadas no estudo do processo de combustão:

- Fração mássica:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \tag{F.1}$$

Onde: $\mathbf{m_k}$ é a massa das espécies k presentes em um dado volume **V**; e **m** á a massa total do gás.

- Pressão total da mistura (considerando a hipótese de usar gases perfeitos)

$$p = \sum_{k=1}^{N} \left(\rho_k . \frac{R}{\gamma_k} . T \right) = \sum_{k=1}^{N} p_k \tag{F.2}$$

Onde: $\boldsymbol{\gamma_k}$ é o peso específico da espécie **k**; $\boldsymbol{\gamma}$ é o peso especifico da mistura; $\boldsymbol{\rho_k}$ é massa específica da espécie **k**; **T** é a temperatura absoluta da mistura; e $\mathbf{p_k}$ é a pressão parcial de cada gás.

- Massa específica da mistura, formada por **N** espécies químicas:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k \tag{F.3}$$

- Fração molar da espécie **k** na mistura:

$$X_k = \frac{\gamma}{\gamma_k} . Y_k = \frac{n_k}{n} \tag{F.4}$$

Onde $\mathbf{n_k}$ é o número de moles do componente; e **n** é o número de moles da mistura.

- Tensor viscosidade $\boldsymbol{\tau_{i,j}}$ devido à carga cisalhante e à carga - deformação linear e angular, segundo Williams (1985):

$$\tau_{i,j} = -\frac{2}{3} . \mu . \frac{\partial v_k}{\partial x_k} . \delta_{i,j} + \mu . \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \tag{F.5}$$

Onde $\boldsymbol{\mu}$ é a viscosidade dinâmica da mistura; $\boldsymbol{\delta_{i,j}}$ é o Delta de Dirac; $\mathbf{v_i}$ e $\mathbf{v_j}$ são projeções da velocidade do escoamento nas direções $\mathbf{x_i}$ e $\mathbf{x_j}$, respectivamente.

F.2 Definição das Equações Gerais de Transporte da Espécies, Quantidade de Movimento e Energia para a Combustão

Para a simulação da combustão, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia no formato diferencial, são representadas como segue:

a. Equação de massa total:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho . v_i)}{\partial x_i} = 0 \qquad \text{(F.6)}$$

Onde $\mathbf{v_i}$ representa a projeção da velocidade do escoamento na coordenada **i**; **t** é o tempo; $\mathbf{x_i}$ é a coordenada ocupada pela espécie **i**.

A equação F.6 também pode ser usada para misturas realizam combustão, porque a combustão não gera massa, Poinsot e Veynante (2005).

b. Equação da massa para misturas com **k** espécies:

Para **k = 1** até **N – 1** (ou **N** se a massa total não é usada), tem-se:

b.1. Caso considerando os efeitos difusivos:

$$\frac{\partial (\rho . Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial \left[\rho . (v_i + V_{k,i}) . Y_k\right]}{\partial x_i} = \dot{\omega}_k \qquad \text{(F.7)}$$

Onde $\mathbf{V_{k,i}}$ é o componente **i** da **Velocidade de Difusão** $\mathbf{V_k}$ da espécie **k**; e $\dot{\omega}_k$ é a **Taxa de Reação** da espécie **k**.

b.2.) Caso considerando a *Aproximação de Hirschfelder e Curtis* e a velocidade de difusão para misturas com multi-espécies, Poinsot e Veynante (2005):

$$\frac{\partial (\rho . Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial \left[\rho . \left(v_i + V_k^e\right) . Y_k\right]}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho . D_k . \frac{\gamma_k}{\gamma} . \frac{\partial X_k}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_k \qquad \text{(F.8)}$$

Onde V_k^e representa a **Velocidade de Difusão de *Hirschfelder e Curtis*** dada pela equação $V_k^e = \sum_{k=1}^{N} D_k . \frac{\gamma_k}{\gamma} . \frac{\partial X_k}{\partial x_i}$; .e $\mathbf{D_k}$ é o **Coeficiente de Difusão de Fick** para a espécie **k**;

c) Equação da Quantidade de Movimento:

Pode ser dada conforme se considera escoamento com ou sem reação de combustão, Poinsot e Veynante (2005):

→ Escoamento com reação de combustão:

$$\frac{\partial(\rho.v_j)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho.v_i.v_j)}{\partial x_i}=-\frac{\partial p}{\partial x_j}+\frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_i}+\rho.\sum_{k=1}^{N}Y_k.f_{k,j} \qquad (F.9)$$

→ Escoamento sem reação de combustão:

$$\frac{\partial(\rho.v_j)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho.v_i.v_j)}{\partial x_i}=-\frac{\partial p}{\partial x_j}+\frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_i} \qquad (F.10)$$

Onde $\mathbf{f_{k,j}}$ representa a **Força do Campo Gravitacional** atuante em cada espécie **k** na direção **j** da mistura.

Embora a equação F.10 não inclui termos de reação explícitos, o escoamento é modificado pela combustão: a viscosidade dinâmica μ é alterada, porque a temperatura pode variar numa razão de 1:8 ou 1:10; a massa específica também é alterada pela mesma razão de temperatura, bem como a dilatação através da frente da chama aumenta para todas as velocidades na mesma razão de temperatura. Conseqüentemente, o número de Reynolds varia significativamente ao longo do escoamento com reação de combustão.

d) Equação da Energia considerando a energia total E:

Pode ser dada pela seguinte equação, considerando que a massa especifica da mistura seja variável, Poinsot e Veynante (2005):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho.E)+\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho.v_i.E)=\dot{\omega}_T-\frac{\partial q_i}{\partial x_j}+\frac{\partial}{\partial x_i}(\sigma_{ij}.v_i)+$$

$$+\dot{Q}+\rho.\sum_{k=1}^{N}Y_k.f_{k,i}.(v_i+V_{k,i}) \qquad (F.11)$$

Onde: $\dot{\omega}_T=-\sum_{k=1}^{N}\Delta h^0_{f,k}.\dot{\omega}_k$, representa a **Taxa de Transferência de Calor devido à Reação de Combustão** das espécies **k** da mistura, função da **Taxa de Reação** $\dot{\omega}_k$ da espécie **k** e da entalpia de formação mássica $\Delta h^0_{f,k}$ destas espécies (ver Tabela F.1).

Tabela F. 1 Entalpias de formação de algumas espécies químicas gasosas na temperatura de referência To igual a 298,15 [K], Poinsot e Veynante (2005)

Substância	Massa específica na base molar Wk [kg/mol]	Entalpia de formação mássica, $\Delta h^0_{f,k}$ [kJ/mol]
CH_4	0,016	-4675
C_3H_8	0,044	-2360
C_8H_{18}	0,114	-1829
CO_2	0,044	-8043
H_2O	0,018	-13435
O_2	0,032	0
H_2	0,002	0
N_2	0,028	0

$q_i = -\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho.\sum_{k=1}^{N} h_k.Y_k.V_{k,i}$, representa o fluxo de calor oriundo da transferência de calor por condução (**Lei de Fourier**) e da difusão de calor pelas espécies **k** com diferentes entalpias, válida para misturas com multi-espécies; $\mathbf{h_k}$, é a entalpia específica (J/kg) para a espécie **k**; $\dot{Q}$ é o **Termo Fonte de Calor** (por exemplo, descarga elétrica, radiação nuclear, entre outros; não representa a reação de combustão).

e) Equação da Energia considerando a energia total específica e_t :

Pode ser dada pela seguinte equação, considerando que a massa específica da mistura seja constante, Poinsot e Veynante (2005):

$$\rho.\frac{\partial e_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho.v_i.e_t) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}.v_i) + \dot{Q} + \rho.\sum_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.(v_i + V_{k,i}) \qquad (F.12)$$

Onde $\mathbf{e_t}$ representa **Energia Total Química** dada pela soma da Energia Sensível, da Energia Química e da Energia Cinética:

$$e_t = e_s + \sum_{k=1}^{N} \Delta h^0_{f,k}.Y_k + \frac{1}{2}.v_i.v_i \qquad (F.13)$$

Onde o terceiro membro da direita representa a **Energia Cinética** (função da velocidade $\mathbf{v_i}$ do escoamento); o segundo membro da direita representa a energia química das espécies na mistura; e $\mathbf{e_s}$ é a **Energia Sensível** (função da temperatura do sistema e da temperatura de estagnação **To**), dada pela seguinte equação:

$$e_s = \int_{To}^{T} Cp.dT + R.\frac{To}{\gamma} \qquad (F.14)$$

Onde **R** é a constante geral dos gases; **To** é a temperatura de referência (ambiente); **Cp** é o calor especifico da mistura; **T** é a temperatura da mistura.

Por outro lado, a energia sensível dada em função da temperatura do sistema e do calor de formação das espécies químicas na mistura com fração mássica $\mathbf{Y_k}$ que sofre combustão, pode ser escrita na forma:

$$e_s = \int_{To}^{T} Cp.dT + R.\frac{To}{\gamma} + \sum_{k=1}^{N} \Delta h_{f,k}^{0}.Y_k \qquad (F.15)$$

A equação F.15 nem sempre tem fácil implementação para algoritmos em CFD, devido à duas razões: primeiro, porque inclui o termo referente à energia química $\sum_{k=1}^{N} \Delta h_{f,k}^{0}.Y_k$ somada à energia sensível, termo este de difícil cálculo; e segundo, porque o fluxo de calor **q** na equação F.12 inclui o novo termo de transporte $\rho.\sum_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.V_{k,i}$, que também é de difícil cálculo.

Desta forma, por conviniência de cálculo, a equação da energia usualmente utilizada na maioria dos algoritmos do CFD é dada como uma função da temperatura, válida para escoamentos com reação de combustão.

Neste caso, usando a relação entre Energia Total Química **e** e a Entalpia Total Química **h** dada por $h = e + P/\rho$, resulta na equação F.6:

$$\rho.\frac{De}{Dt} = \rho.\frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p.\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \qquad (F.16)$$

Aplicando a equação F.16 na equação F.15, resulta a equação de conservação para a entalpia total química **h**:

$$\rho.\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho.u_i.h) = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tau_{ij}.u_i\right) + \dot{Q} + \rho.\sum_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad (F.17)$$

A energia total química pode ser definida como sendo:

$$h = h_S + \sum_{k=1}^{N} \Delta h_{f,k}^{0}.Y_k \qquad (F.18)$$

Onde **hs** é a **Entalpia Sensível**, função da temperatura.

Isolando a entalpia **hs** na equação F.18, substituindo-a na equação F.17 e usando a equação F.11, resulta:

$$\rho.\frac{\partial h_S}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho.\sum_{k=1}^{N} h_{s,k}.Y_k.V_{k,i}\right) +$$

$$+\tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\dot{Q}+\rho.\Sigma_{k=1}^{N}Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad (F.19)$$

Em alguns algoritmos utilizados em CFD, referentes às condições de baixo número de Mach (**M < 0.3**) ou escoamentos incompressíveis, a equação F.19 pode ser reescrita considerando apenas a temperatura, sendo a entalpia sensível da mistura definida pela seguinte equação:

$$h_S=\Sigma_{k=1}^{N}h_{s,k}.Y_k \qquad (F.20)$$

Derivando a equação F.20 com relação ao tempo, resulta:

$$\rho.\frac{Dh_S}{Dt}=\sum_{k=1}^{N}hs,k.\rho.\frac{DY_k}{Dt}+\rho.Cp.\frac{DT}{Dt} \qquad (F.21)$$

Substituindo a equação F.21 na equação F.19, resulta a equação da energia sob o aspecto da temperatura na mistura, considerando a condição **M < 0.3** :

$$\rho.Cp.\frac{DT}{Dt}=\dot{\omega}_T'+\frac{Dp}{Dt}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i}\right)-\left(\rho.\Sigma_{k=1}^{N}C_{p,k}.Y_k.V_{k,i}\right)\frac{\partial T}{\partial x_i}+$$

$$+\tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\dot{Q}+\rho.\Sigma_{k=1}^{N}Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad (F.22)$$

Na equação F.22, o novo termo $\dot{\omega}_T'$ representa a **Taxa de Transferência de Calor devido ao Gradiente de Temperatura** das espécies **k** da mistura, sendo dada pela equação:

$$\dot{\omega}_T'=-\sum_{k=1}^{N}h_k.\dot{\omega}_k=-\sum_{k=1}^{N}h_{s,k}.\dot{\omega}_k-\sum_{k=1}^{N}\Delta h_{f,k}^{o}.\dot{\omega}_k \qquad (F.23)$$

Na equação F.23, os dois termos da direita são ambos conhecidos como taxas de transferência de calor, diferenciando-se apenas numa pequena quantidade devido à contribuição da **entalpia sensível $h_{s,k}$**. Se a **capacidade térmica $C_{p,k}$** de todas as espécies **k** forem iguais, os dois termos da direita são iguais.

Para a condição de capacidade térmica constante para todas as substancias, as taxas $\dot{\omega}_T'$ e $\dot{\omega}_K$ são iguais, pois $\mathbf{h_{s,k}} = \mathbf{hs}$ na equação F.23.

e.1) <u>Chamas à pressão constante</u>:

Consistem nas chamas ignitadas por deflagração, onde a sua velocidade de propagação **u** é muito pequena se comparada à velocidade do som $\mathbf{c_1}$ (valores típicos da velocidade variando de 0,1 a 5 [m/s], com a velocidade do som para gases situando-se entre 300 a 600 [m/s]), Chung (2002). Como para baixos números de Mach ($\mathbf{u / c_1}$), a pressão total na equação

de estado pode ser considerada constante, e o termo de aquecimento na equação de temperatura F.22, $\Phi = \tau ij.(\partial u_i / \partial x_j)$, pode ser desprezado, logo:

$$\rho.\frac{\partial h_S}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho.\Sigma_{k=1}^{N} C_{p,k}.Y_k.V_{k,i}\right) + \\ + \dot{Q} + \rho.\Sigma_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad \text{(F.24)}$$

e.2) Chamas com capacidade térmica constante para todas as espécies:

Admitindo que a capacidade térmica para todas as espécies $\mathbf{C_{p,k}}$ seja constante e independente da temperatura, ou seja, $\mathbf{C_{p,k} = C_p}$, então a entalpia sensível para todas as espécies $\mathbf{h_{s,k}}$ também será constante, ou seja, $\mathbf{h_{s,k} = hs}$. Esta hipótese pode não ser frequentemente verdadeira, porém tem sido usada em muitas simulações devido a simplificação dos cálculos, pois o termo $\sum_{k=1}^{N} C_{p,k}.Y_k.V_{k,i}$ na equação F.20 torna-se $C_p \sum_{k=1}^{N}.Y_k.V_{k,i} = 0$, resultando duas condições:

a) Para pressão variável

$$\rho.C_p\frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) + \tau_{ij}.\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho.\sum_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad \text{(F.25)}$$

b) Para pressão constante e baixa velocidade **u**:

$$\rho.C_p\frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) + \dot{Q} + \rho.\sum_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad \text{(F.27)}$$

→ Chamas com capacidade térmica constante somente para a mistura:

Este caso também é possível de encontrar em muitas simulações, assumindo que a capacidade térmica da mistura é constante, porque uma das espécies (o nitrogênio N_2, por exemplo) é dominante na mistura, porém as capacidades térmicas das outras espécies não sejam iguais. Esta aproximação é relativamente inconsistente porque a capacidade térmica da mistura depende da capacidade térmica de cada espécie, ou seja, $C_p = \sum_{k=1}^{N} C_{p,k}.Y_k$. Contudo, a mesma é usada por Kuo (1986), por exemplo, para obter a equação de temperatura pela definição $Dh_s/Dt = C_p.Dt/Dt$ na equação F.19, para o seguinte formato:

$$\rho.Cp.\frac{DT}{Dt} = \dot{\omega}_T' + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda.\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho.T.\sum_{k=1}^{N} C_{p,k}.Y_k.V_{k,i}\right) + \\ + \tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho.\Sigma_{k=1}^{N} Y_k.f_{k,i}.V_{k,i} \qquad \text{(F.28)}$$

Onde $\mathbf{h_{s,k}}$ foi substituído pelo produto $\mathbf{C_{p,k}.\ T.}$

Apêndice G

RESUMO DOS ARTIGOS DESENVOLVIDOS

Nesta seção, desenvolve-se uma breve apresentação dos artigos implementados pela Tese de Doutorado e que têm participação em congressos internacionais e publicação em periódicos, em ordem cronológica.

G.1 Publicações em Congressos

(1) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N, 2004, Preliminary Application of CFX as Tool in the Aerodynamic Study of Combustion Chamber for Micro Gas Turbine, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Vouliagmeni-Kavouri, Attica, Greece, 19-23 August, www.wseas.org.

Resumo:

O uso de micro turbinas a gás representa ser uma alternativa energética promissora na medida que pode prover eletricidade em regiões isoladas, ao mesmo tempo, assistir a crescente demanda de energia regional no Brasil, onde mais de 10 % da energia elétrica gerada provem de centrais termelétricas. Além disso, considerando a existência de programas ambientais para o controle da emissão dos agentes poluentes NOx, CO e SOx, as pequenas centrais termelétricas por operarem com combustíveis de baixo poder calorífico, é necessário a melhoria da combustão na medida de controlar problemas associados à: instabilidade da chama; limites de flamabilidade; natureza da chama; e as altas taxas de emissão de poluentes

durante a combustão. Quaisquer que sejam estes problemas, o estudo aerodinâmico das câmaras de combustão é relevante na medida que a formação de regiões onde a recirculação se faz presente, pode afetar o tempo de residência da chama e, conseqüentemente, a eficiência da combustão.

Considerando o progresso no desenvolvimento de modelos matemáticos mais sofisticados para simular o comportamento da combustão nas turbinas a gás, não existe uma aplicação específica nas câmaras de combustão do tipo anular para micro turbinas a gás, somente nas câmaras do tipo cilíndrica ou tubular para grandes turbinas a gás.

Desta forma, este trabalho realiza um estudo aerodinâmico comparativo entre diferentes modelos de escoamentos com a proposta de determinar o melhor modelo que tenha capacidade para descrever o comportamento aerodinâmico de uma câmara de combustão do tipo anular usando um combustível de baixo poder calorífico, aplicando o cálculo CFD via o pacote comercial CFX v 5.7®.

(2) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N, 2005, CFX Application to the Modeling of Combustion Chamber for Micro Gas Turbines, ANSYS Latin American Users Conference, São Paulo, Brasil, 10-11 August.

Resumo:

Devido à flexibilidade e à facilidade de programação, este trabalho aplica o cálculo CFD usando CFX na simulação do comportamento da chama gerada por um modelo da câmara de combustão. Esta câmara gera a energia necessária para operar um protótipo de micro turbina de gás com potência até 30 quilowatts, a qual está instalada no laboratório do núcleo de sistemas térmicos - NEST - na Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI. Esta micro turbina de gás é fabricada pela Harvester Company com identificação T-62T-32. Para isto, o CFX é usado para levantar os campos de velocidade, pressão e temperatura. Desta forma, mostra-se que os resultados obtidos podem ser uma referência para validar o CFX como uma ferramenta computacional promissora para o desenvolvimento de pesquisa de extensão, Dissertações e Teses na UNIFEI.

(3) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N., 2005, Modeling Of Annular Combustion Chambers Using CFD, 3rd IASME / WSEAS International Conference on Heat Transfer, Thermal Engineering and Environment, Corfu, Greece, 20-22 August.

Resumo:

O principal objetivo deste trabalho é mostrar dois modelos de combustão aplicados em uma câmara de combustão anular para micro turbinas de gás, considerando os aspectos sobre a velocidade, a pressão e a temperatura, que podem ser usados para caracterizar o

comportamento da chama e seus efeitos na emissão de poluentes e na eficiência da combustão, uma vez que o mesmo tem apresentado resultados satisfatórios baseados em outros trabalhos usando simulações em câmara de combustão do tipo tubular. O domínio geométrico é similar ao protótipo de uma câmara de combustão desenvolvida pela Harvester Company, modelo T-62T-32. A simulação térmico-aerodinâmica é executada pelo CFD usando os modelos da combustão: Eddy Dissipation Model - EDM e o Flamelet Model - FLM. O modelo de turbulência é o RNG K-e. O modelo da radiação é P1 usando o modelo da emissão de NOx de Zeldovich para o metano com 2 etapas da reação química. Nesta câmara de combustão anular, os injetores têm um ângulo de inclinação e, relação ao eixo principal da câmara de combustão, e há um fluxo secundário com movimento giratório. Desta forma, há uma recirculação próxima à zona da combustão, a qual pode permiter o aumento do tempo de residência da chama, a qual pode ser pouco difusa e com transferência uniforme de calor por convecção e por radiação.

(4) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N., 2005, Analysis of Flame Behavior in Small Combustion Chambers Using CFD, Proceedings of COBEM 2005, 18th International Congress of Mechanical Engineering by ABCM, Ouro Preto, Brazil, 6-11 November.

Resumo:

O uso das micro turbinas a gás na eletrificação regional no Brasil é uma alternativa energética promissora na medida que pode ser instalada em qualquer lugar, com potência até 300 quilowatts e com pequenas dimensões. Embora, alguns limites sejam conhecidos, tais como: sua baixa eficiência (até 30 %); instabilidade da chama; e emissões de agentes poluentes, seu projeto otimizado depende da análise do comportamento da chama. Desta forma, muitos fabricantes têm procurado melhorar o desempenho destes equipamentos a partir de testes experimentais e numéricos Assim, é possível definir os efeitos criados pela: geometria (cilíndrica ou anular); quantidade e posição dos injetores; caracterização das chamas (difusão ou turbulentas); quantidade de etapas para as reações químicas; e emissão de poluentes e incombustos. Por causa disso, este trabalho mostra um estudo particular sobre o comportamento da chama gerada em um modelo de micro turbina a gás com câmara de combustão do tipo anular, e a simulação termo-aerodinâmica usando o CFD. Os resultados são baseados nas distribuições de velocidade, pressão e temperatura. O líquido de trabalho é o metano com combustão até 2 etapas. Os modelos matemáticos usados estudam o escoamento, a combustão e a transferência de calor por radiação, tais como: Modelo de turbulência RNG K-e; Modelo de Combustão - EDM; e o modelo da radiação P1.

(5) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N., 2006, The Mathematical Approximation in Numerical Analysis for a Combustion Chamber for Small Gas Turbines Using CFD, 1st IASME / WSEAS International Conference on Heat Transfer, Computational Heat and Mass Transfer, Miami, FL, USA, 18-20 January.

Resumo:

A aplicação da aproximação matemática nas simulações numéricas para conhecer o comportamento de certos fenômenos físicos é um caminho promissor com baixos custos, considerando a existência de computadores rápidos. Desta forma, os projetistas de turbinas a gás têm usado esta importante ferramenta para melhorar a performance dos equipamentos e viabilidade econômica, em particular, das câmaras de combustão, principalmente em função do comportamento da chama e seus efeitos na estrutura, depedendo do combustível usado e do domínio geométrico. Neste trabalho, apresentam-se algumas destas aproximações matemáticas usadas pelo Cálculo da Dinâmica de Fluidos – CFD no estudo do comportamento da chama, considerando os modelos de escoamento, de combustão, de transferência de calor por radiação e modelos de emissão de NOx, os quais são típicos para câmaras de combustão do tipo anular. A analise dos resultados é feita considerando aspectos quanto a distribuição de pressão, velocidade e temperatura para uma pequena turbina a gás desenvolvida pela Harvester Company, Modelo T-62T-32, instalada na Universidade Federal de Itajubá – UNIFEI.

(6) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N., 2006, Computational Fluid Dynamic Applied To Combustion Chamber For Small Gas Turbines Using Natural Gas, Proceedings of the 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering – ENCIT, Braz. Soc. of Mechanical Sciences and Engineering – ABCM, Curitiba, PR, Brasil, 12-14 December.

Resumo:

Este trabalho enfoca o desenvolvimento de um procedimento prático utilizado softwares comerciais para estudar o comportamento da chama (escoamento ecombustão) em uma câmara de combustão anular para micro turbina a gás, visando verificar sua adaptabilidade e viabilidade econômica para usar diferentes tipos de combustiveis. Para isso, utiliza-se como combustível o gás metano para representar o gás natural, cuja composição química é feita por 88 [%] em volume de metano. Entre os softwares aplicados, destacam-se: GateCycle®, o qual é útil para calcular os parâmetros termodinâmicos da câmara de combustão para um ciclo de micro turbina a gás; Gaseq®, o qual é útil para calcular as reações

químicas e a concentração de reagentes e produtos, afim de estimar as emissões; e CFX®, o qual é útil para simular a dinâmica de fluidos, a combustão, transferência de calor por radiação e emissões. A combustão em CFD é simulada através do modelo EDM ("Eddy Dissipation Model") com duas etapas de reação química para o metano. A turbulência é simulada utilizando-se o modelo RNG k-ε. A transferência de calor por radiação é simulada pelo Método P1 e as emissões de NOx são obtidas usando-se os modelos de Fenimore e Zeldovich. Os resultados numéricos esperados são os campos de velocidade média, pressão média relativa e temperatura média, para caracterizar as perdas de carga e o volume da chama. Desta forma, torna-se possível determinar: os parâmetros que afetam a posição da chama; a temperatura máxima da chama; a temperatura do gás quente na exaustão; os efeitos dos injetores; os efeitos da chama do gás metano no projeto; e o valor preliminar da eficiência da câmara de combustão. Além disso, apresenta-se um típico processo de validação para o CFD em câmara de combustão com domínio tridimensional.

G.2 Publicações em Periodicos

(1) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N, 2004, Preliminary Application of CFX as Tool in the Aerodynamic Study of Combustion Chamber for Micro Gas Turbine, Extended Version, Lecture Series on Computer and Computational Sciences – European Society of Computational Methods in Sciences and Engineering, VSP International Sciences Publishers, Vol. 1, ISSN 1573-4196, Netherlands, pp. 16-19, http://www.vspub.com

Resumo:

Trata-se de uma versão extendida do artigo apresentado no International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2004) na Grécia, agosto de 2004. Detalha o estudo aerodinâmico realizado em uma câmara de combustão do tipo anular objetivando verificar qual modelo de turbulência tem maior representatividade do escoamento interno neste equipamento.

(2) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N, 2005, Numerical Analysis Of Annular Combustion Chambers Using CFD, IASME TRANSACTIONS Issue 8, Volume 2, ISSN 1790-031X, pp1350-1360, http://www.iasme.org.

Resumo:

A análise numérica tem sido mostrada ser uma ferramenta promissora para a engenharia estudar fenômenos físicos particulares sem custos adicionais com relação aos

testes experimentais. Adicionalmente, o uso das micro turbinas a gás é uma promissora alternativa energética ao desenvolvimento regional do Brasil. Desta forma, considerando os resultados satisfatórios já obtidos pelas simulações em câmaras de combustão do tipo tubular usando o cálculo CFD, este trabalho têm como principal objetivo mostrar dois modelos da combustão aplicados para uma câmara de combustão do tipo anular, considerando os aspectos sobre a velocidade, a pressão e a temperatura, que podem ser usados para caracterizar o comportamento da chama e seus efeitos sobre a emissão de poluentes. Para isto, o domínio geométrico é similar ao protótipo de uma pequena câmara de combustão fabricada pela Harvester Company, modelo T-62T-32. A simulação térmico-aerodinâmica é executada pelo CFD usando os modelos da combustão: Eddy Dissipation Model - EDM e o Flamelet Model - FLM. O modelo de turbulência é o RNG K-e. O modelo da radiação é P1 usando o modelo da emissão de NOx de Zeldovich para o metano com 2 etapas da reação química. Nesta câmara de combustão anular, os injetores têm um ângulo de inclinação e, relação ao eixo principal da câmara de combustão, e há um fluxo secundário com movimento giratório. Desta forma, há uma recirculação próxima à zona da combustão, a qual pode permiter o aumento do tempo de residência da chama, a qual pode ser pouco difusa e com transferência uniforme de calor por convecção e por radiação.

(3) Alencar H. S., Villanova H. F., Antonio Rosa M. N., 2006, The Mathematical Approximation in Numerical Analysis for a Combustion Chamber for Small Gas Turbines Using CFD, Extended Version, WSEAS Transactions on Heat and Mass Transfer, Issue 2, Volume 1, ISSN 1790-5044, pp135-143, http://www.wseas.org.

Resumo:

Trata-se de uma versão extendida do artigo apresentado no 1st IASME / WSEAS International Conference on Heat Transfer, Computational Heat and Mass Transfer em Miami, janeiro de 2006. Detalha o estudo do comportamento da chama produzida em uma câmara de combustão do tipo anular, a partir do levantamento das distribuições de temperatura, velocidade e pressão. Mostra-se as aproximações matemáticas que detêm melhores resultados com relação à precisão, seja na simulação da turbulência, da transferência de calor por radiação, no processo de combustão e na formação do NOx.