



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

**TESE DE DOUTORADO**

**Análise do Uso de CFD para o Regime de  
Combustão Sem Chama Visível  
em uma Fornalha**

**Autor: Fagner Luís Goulart Dias**

**Orientador: Prof. Dr. Marco Antonio Rosa do Nascimento**

**Co-orientadora: Profa. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues**

Itajubá, Agosto de 2014

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

**Fagner Luís Goulart Dias**

**Análise do Uso de CFD para o Regime de  
Combustão Sem Chama Visível  
em uma Fornalha**

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

Área de Concentração: **Conversão de Energia**

Orientador: **Prof. Dr. Marco Antonio Rosa do Nascimento**

Co-orientadora: **Profa. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues**

Agosto de 2014

Itajubá - MG

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá –  
Bibliotecária Margareth Ribeiro-CRB\_6/1700

D541a

Dias, Fagner Luís Goulart

Análise do uso de CFD para o regime de combustão sem chama visível em uma fornalha / Fagner Luís Goulart Dias. --Itajubá, (MG) : [s.n.], 2014.

143 p. : il.

Orientador: Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento.

Coorientadora: Profa. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Itajubá.

1. Combustão sem chama visível. 2. Modelagem numérica em CFD. 3. Flameless. 4. MILD. I. Nascimento, Marco Antônio Rosa do, orient. II. Rodrigues, Lucilene de Oliveira, coorient. III. Universidade Federal de Itajubá. IV. Título.

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

**Fagner Luís Goulart Dias**

**Análise do Uso de CFD para o Regime de  
Combustão Sem Chama Visível  
em uma Fornalha**

Tese aprovada por banca examinadora em 08 de agosto de 2014,  
conferindo ao autor o título de *Doutor em Ciências em  
Engenharia Mecânica*.

**Banca Examinadora:**

Prof. Dr. Marco Antonio Rosa do Nascimento (orientador)

Profa. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues (co-orientadora)

Profa. Dra. Ivonete Ávila

Prof. Dr. Anton Skyrda Veríssimo

Profa. Dra. Luciana Márcia de Oliveira Melo

Prof. Dr. Genésio José Menon

Agosto de 2014

Itajubá - MG

## **Dedicatória**

Gostaria de dedicar este trabalho a minha querida esposa Mellina,  
sempre ao meu lado em todos os grandes momentos,  
bem como meus pais, irmãos, familiares e amigos.

## **Agradecimentos**

**Ao meu orientador Prof. Marco Antonio**  
pelo suporte técnico indispensável durante todo este trabalho.

**À minha co-orientadora e amiga Profa. Lucilene**  
pelo companheirismo e pelos valiosos conselhos.

**À minha querida esposa Mellina,**  
que ao longo de todos esses anos juntos, sempre esteve ao meu lado e nunca me deixando  
desistir diante das dificuldades.

**Aos meus pais Luiz Roberto Dias e Célia Maria Goulart,**  
que me deram a possibilidade de estudar e poder conquistar tantas vitórias.

**Aos amigos e colaboradores Anton Veríssimo e Luiz Carlos Bevilaqua**  
pelas valiosas discussões que surgiram ao longo do trabalho.

**À Universidade Federal de Itajubá**  
por toda estrutura disponibilizada e pela oportunidade de trabalhar com ótimos profissionais.

**Aos órgãos de fomento CAPES, FAPEMIG e CNPq**  
pelo apoio financeiro essencial fornecido no decorrer deste trabalho.

*Não se acostume com o que não o faz feliz, revolte-se quando julgar necessário.*

*Alague seu coração de esperanças, mas não deixe que ele se afogue nelas.*

*Se achar que precisa voltar, volte!*

*Se perceber que precisa seguir, siga!*

*Se estiver tudo errado, comece novamente.*

*Se estiver tudo certo, continue.*

*Se sentir saudades, mate-a.*

*Se perder um amor, não se perca!*

*Se o achar, segure-o!*

Trecho de "Mude!", Fernando Pessoa.

## Resumo

**DIAS, F. L. G. (2014)**, *Análise do Uso de CFD para o Regime de Combustão Sem Chama Visível em uma Fornalha*, Itajubá, 143 p. Tese de Doutorado, Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Esta tese apresenta o uso da ferramenta CFD na modelagem de problemas envolvendo um regime relativamente novo de combustão, conhecido como Combustão Sem Chama Visível. Tal regime tem se mostrado promissor pela elevada eficiência da combustão aliada a baixos níveis de emissões de poluentes, sobretudo dos óxidos nitrogenados,  $\text{NO}_x$ .

Foram investigados inúmeros trabalhos a fim de estabelecer as principais características para obtenção deste regime e sua modelagem numérica. Dentre os mais empregados estão o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  *Realizable* (KER), de combustão *Eddy Dissipation Concept* (EDC) e de radiação *Discrete Ordinates* (DO), aliados a mecanismos de cinética química detalhados.

Com base no trabalho experimental de Veríssimo (2011), foram investigados aqueles modelos que seriam mais adequados à previsão numérica deste regime, bem como a necessidade de ajustes. Os resultados iniciais com mecanismo global de reação apresentaram temperaturas elevadas, sobretudo nos planos radiais próximos ao injetor, o que refletiu negativamente no teor de  $\text{NO}_x$  obtido. No caso da biblioteca de reações detalhadas GRIMech 3.0, as temperaturas ficaram mais atenuadas, porém com nível de CO e  $\text{NO}_x$  acima do experimental, além do grande tempo computacional gasto de cerca de 380 horas. Em seguida, foi avaliado o mecanismo KEE58, que reduziu o tempo computacional a 1/3 do anterior, com resultados próximos. Contudo, em razão do nível de CO ter permanecido elevado, foi analisado o aumento do parâmetro de tempo do modelo EDC, o que culminou em melhores resultados, reafirmando a importância de se ajustar os parâmetros matemáticos. Ao final, tornou-se possível estabelecer um procedimento numérico e identificar a importância dos ajustes nas constantes matemáticas dos modelos, sobretudo na formação de CO e  $\text{NO}_x$ .

Palavras-chave: combustão Sem Chama Visível; modelagem numérica; *flameless*; *MILD*.

## Abstract

**DIAS, F. L. G. (2014)**, *Analysis of CFD use in a flameless combustion regime applied to a furnace*, Itajubá, 143 p. PhD Thesis, Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

This thesis presents the use of CFD in numerical modeling problems involving a new combustion regime that emerged in the early 1990s, known as flameless combustion. This regime has shown promising by combining high combustion efficiency and reduced levels of pollutant emissions, especially NO<sub>x</sub>.

Numerous studies was investigated in order to establish the main features of the this combustion regime and to obtain their numerical modeling. Among the numerical models the most widely used in the turbulence modeling is the k-ε realizable (KER), the Eddy Dissipation Concept (EDC) for combustion and the Discrete Ordinates (DO) for radiation modeling, as well as use of detailed reaction mechanisms.

Based on Veríssimo (2011) experimental data, those models that would be more suitable for numerical prediction of this regime, as well as the needs of adjustments were investigated. Initial results with global reaction mechanism showed elevated temperatures, especially close to the burner injector, which reflected negatively on the NO<sub>x</sub> content at radial planes plotted. In the case of GRIMech3.0 detailed reactions, the temperatures remained moderate, but with a CO and NO<sub>x</sub> levels above the experimental data, beyond the large computational time used, about 380 hours. So, it was evaluated another reaction list, the KEE58, that reduced the computational time to 1/3 of the previous, with similar results. However, due to the CO level has remained elevated, it was investigated the EDC time parameter, that resulted in better results, confirming the relevance of adjust mathematical parameters.

Key-words: numerical modeling; flameless; CFD; MILD combustion.

## Sumário

<b>DEDICATÓRIA .....</b>	<b>V</b>
<b>AGRADECIMENTOS .....</b>	<b>VI</b>
<b>RESUMO.....</b>	<b>VIII</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>IX</b>
<b>SUMÁRIO.....</b>	<b>X</b>
<b>LISTA DE FIGURAS.....</b>	<b>XIII</b>
<b>LISTA DE TABELAS .....</b>	<b>XVIII</b>
<b>SIMBOLOGIA LETRAS LATINAS.....</b>	<b>XIX</b>
<b>SIMBOLOGIA LETRAS GREGAS.....</b>	<b>XX</b>
<b>SUBSCRITOS.....</b>	<b>XXI</b>
<b>SIGLAS .....</b>	<b>XXII</b>
<b>CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Objetivos.....</b>	<b>3</b>
1.1.1 Objetivo geral.....	3
<b>1.2 Objetivos específicos.....</b>	<b>4</b>
<b>1.3 Organização do Trabalho .....</b>	<b>4</b>
<b>CAPÍTULO 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>6</b>
<b>2.1 Características do Regime de Combustão Sem Chama Visível .....</b>	<b>6</b>
<b>2.2 Conceitos Principais .....</b>	<b>8</b>
<b>2.3 Modelagem Numérica do Regime de Combustão Sem Chama Visível .....</b>	<b>13</b>
<b>CAPÍTULO 3 MECANISMOS DE FORMAÇÃO DE POLUENTES.....</b>	<b>18</b>
<b>3.1 Introdução .....</b>	<b>18</b>
<b>3.2 Monóxido de Carbono.....</b>	<b>19</b>

<b>3.3</b>	<b>Óxidos de Nitrogênio</b> .....	<b>20</b>
<b>3.4</b>	<b>Formação de NO<sub>x</sub></b> .....	<b>20</b>
3.4.1	Mecanismo térmico ou de Zeldovich.....	20
3.4.2	Mecanismo imediato/rápido (NO <i>prompt</i> ou de <i>Fenimore</i> ).....	23
3.4.3	Mecanismo via N <sub>2</sub> O (óxido nitroso)/rápido.....	23
3.4.4	Mecanismo via combustível.....	24
<b>CAPÍTULO 4 DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL</b> .....		<b>25</b>
<b>4.1</b>	<b>Introdução</b> .....	<b>25</b>
<b>4.2</b>	<b>Métodos de Discretização</b> .....	<b>26</b>
<b>4.3</b>	<b>Malhas Numéricas</b> .....	<b>28</b>
4.3.1	Malhas ortogonais e não ortogonais.....	29
4.3.2	Malhas estruturadas e não estruturadas.....	30
4.3.3	Malhas estruturadas adaptadas.....	32
<b>4.4</b>	<b>Modelagem da Turbulência</b> .....	<b>32</b>
<b>4.5</b>	<b>Abordagem DNS</b> .....	<b>34</b>
<b>4.6</b>	<b>Abordagem LES</b> .....	<b>35</b>
<b>4.7</b>	<b>Abordagem RANS</b> .....	<b>36</b>
<b>4.8</b>	<b>Modelagem Numérica da Turbulência</b> .....	<b>38</b>
4.8.1	Modelos algébricos ou Zero Equação.....	38
4.8.2	Modelos de uma equação.....	39
4.8.3	Modelos de duas equações.....	40
<b>4.9</b>	<b>Modelagem da Combustão</b> .....	<b>42</b>
4.9.1	Eddy Dissipation Concept, EDC.....	44
<b>4.10</b>	<b>Modelagem da Radiação</b> .....	<b>45</b>
4.10.1	Discretas Ordinates, DO.....	46
<b>4.11</b>	<b>Mecanismos de Reação</b> .....	<b>47</b>
<b>CAPÍTULO 5 EXPERIMENTO: CARACTERÍSTICAS DO QUEIMADOR SEM CHAMA VISÍVEL</b> .....		<b>48</b>
<b>5.1</b>	<b>Aspectos básicos do queimador</b> .....	<b>48</b>
<b>5.2</b>	<b>Procedimento de Medida</b> .....	<b>50</b>
<b>5.3</b>	<b>Condições experimentais utilizadas</b> .....	<b>51</b>

<b>CAPÍTULO 6 SIMULAÇÃO NUMÉRICA: RESULTADOS E DISCUSSÕES.....</b>	<b>55</b>
<b>6.1 Introdução .....</b>	<b>55</b>
<b>6.2 Análise de Periodicidade .....</b>	<b>58</b>
<b>6.3 Independência de malha .....</b>	<b>67</b>
6.3.1 Malha grossa.....	68
6.3.2 Malha superfina.....	69
6.3.3 Malha fina.....	71
<b>6.4 Análise do Processo de Combustão.....</b>	<b>72</b>
6.4.1 Simulação 1: Condição inicial utilizada (KES/EDC1step/DO)	72
6.4.2 Simulação 2: KER/EDC1step/DO.....	76
6.4.3 Simulação 3: KER/EDC_2Step/DO.....	80
6.4.4 Simulação 4: KER/EDC_GRIMech 3.0/DO.....	97
6.4.5 Simulação 5: KER/EDC_KEE58/DO.....	114
6.4.6 Simulação 6: KER/EDCMod_KEE58/DO.....	118
6.4.7 Simulação 7: KER/FRED2step/DO.....	121
6.4.8 Simulação 8: KER/FREDMod2step/DO.....	125
<b>CAPÍTULO 7 CONCLUSÕES .....</b>	<b>129</b>
<b>7.1 Trabalhos Futuros .....</b>	<b>131</b>
<b>BIBLIOGRAFIA .....</b>	<b>133</b>
<b>ANEXO A BIBLIOTECA DE REAÇÕES CHEMKIN KEE58 .....</b>	<b>140</b>

## Lista de Figuras

Figura 2.1 Sequência de imagens instantâneas da queima de gás natural com diluição progressiva de $N_2$ e $CO_2$ .....	7
Figura 2.2 Níveis de ruído e emissão de $NO_x$ na combustão Sem Chama Visível.....	9
Figura 2.3 Regimes de combustão em função da temperatura de pré-aquecimento do ar e teor de oxigênio .....	10
Figura 2.4 Comparativo entre processos de combustão: .....	11
Figura 2.5 Imagens de uma chama difusa até a obtenção do regime Sem Chama Visível .....	11
Figura 2.6 Combustão Sem Chama Visível pelo radical $OH^*$ .....	12
Figura 4.1 Distribuição de temperatura na placa: M1 (134 nós), M2 (620 nós) e M3 (3335 nós) .....	27
Figura 4.2 Representação de dois elementos de malha (a) ortogonal (b) não ortogonal.....	29
Figura 4.3 Adaptatividade dos elementos de malha (a) ortogonal e (b) não ortogonal.....	30
Figura 4.4 Malhas estruturadas (a) tipo H, (b) tipo O e (c) tipo C. ....	31
Figura 4.5 Exemplo de Malhas não estruturada .....	32
Figura 4.6 Comparativo entre as principais abordagens na modelagem da turbulência. ....	34
Figura 4.7 Solução para diferentes abordagens de turbulência .....	35
Figura 4.8 Exemplo de cálculo em CFD utilizando a abordagem LES.....	36
Figura 4.9 Exemplo de cálculo em CFD utilizando a abordagem RANS .....	36
Figura 4.10 Modelos numéricos de combustão presentes no ANSYS .....	44
Figura 4.11 Perfis de temperatura dos gases de combustão com coeficiente de absorção: (a) constante e (b) ferramenta WSSGM.....	46
Figura 5.1 Representação esquemática a) bancada experimental b) perspectiva tridimensional do queimador .....	49
Figura 5.2 Detalhe do posicionamento dos injetores e do revestimento do queimador .....	49

Figura 5.3 Esquema do posicionamento das medidas experimentais nos planos radiais a) medidas realizadas b) sugestão de amostras.....	50
Figura 5.4 Emissões de NO <sub>x</sub> e CO em função do coeficiente de excesso de ar .....	52
Figura 5.5 Aparência do modo de combustão ao longo do queimador para diferentes $\lambda$ . (a) $\lambda = 1,1$ ; (b) $\lambda = 1,3$ ; (c) $\lambda = 1,5$ ; (d) $\lambda = 1,7$ ; (e) $\lambda = 1,9$ e (f) $\lambda = 2,1$ .....	53
Figura 5.6 Perfis axiais de temperatura e concentração de espécies químicas em função da coordenada z (CO <sub>2</sub> , CO e HC) para $\lambda = 1,3$ (teste 2) .....	53
Figura 5.7 Perfis axiais de temperatura e concentração de espécies químicas em função da coordenada z, para $\lambda = 1,3$ (teste 2).....	54
Figura 5.8 Concentração de espécies químicas (NO <sub>x</sub> e CO) para $\lambda = 1,3$ (teste 2) mediante variação da velocidade de injeção do ar ao longo do queimador .....	54
Figura 6.1 Comparativo do fluxo reverso identificado nas simulações: .....	57
Figura 6.2 Distribuição dos residuais em <i>Second Order Upwind</i> . .....	58
Figura 6.3 Setor correspondente a 1/16 do domínio.....	59
Figura 6.4 Vetores velocidade considerando 1/16 do queimador. ....	59
Figura 6.5 Desenho completo em SolidWorks® do queimador.....	60
Figura 6.6 Vetores velocidade para o queimador completo .....	60
Figura 6.7 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade ao longo do eixo central .....	61
Figura 6.8 Detalhe dos elementos de malha presentes no eixo central. ....	61
Figura 6.9 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade radial a 45 mm do injetor. ....	62
Figura 6.10 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade radial a 16 mm do injetor. ....	63
Figura 6.11 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade radial a 79 mm do injetor .....	63
Figura 6.12 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade radial a 113 mm do injetor. ....	63
Figura 6.13 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade radial a 147 mm do injetor. ....	64
Figura 6.14 Setor <i>versus</i> completo para o vetor velocidade radial a 181 mm do injetor. ....	64
Figura 6.15 Malha empregada nas simulações envolvendo a metade do queimador.....	65
Figura 6.16 Vetores ao longo do plano longitudinal para a metade do domínio.....	65
Figura 6.17 Vetor velocidade para metade do queimador ao longo do eixo central. ....	66
Figura 6.18 Vetor velocidade radial para metade do queimador a 45 mm do injetor. ....	66
Figura 6.19 Malha grosseira gerada com elementos 8x12 mm. ....	68
Figura 6.20 Velocidades v no plano central na malha grosseira 8x12 mm. ....	69
Figura 6.21 Velocidades v radial a 45 mm do injetor na malha grosseira 8x12 mm. ....	69
Figura 6.22 Malha superfina gerada com elementos 2x3 mm.....	70

Figura 6.23 Distribuição dos vetores velocidade $v$ para elementos 2x3 mm. ....	70
Figura 6.24 Vetores velocidade $v$ no plano central para elementos 2x3 mm. ....	70
Figura 6.25 Comparativo dos vetores velocidade $v$ no plano central em função dos elementos de malha utilizados. ....	71
Figura 6.26 Comparativo dos vetores velocidade $v$ à 45 mm do injetor em função dos elementos de malha utilizados. ....	72
Figura 6.27 Distribuição dos vetores velocidade com combustão (KES/EDC/DO). ....	73
Figura 6.28 Distribuição de velocidade no plano de simetria (KES/EDC/DO). ....	73
Figura 6.29 Distribuição de temperatura para KES/EDC1step/DO ao longo do eixo central..	74
Figura 6.30 Campo de temperatura distribuído no queimador (KES/EDC/DO). ....	75
Figura 6.31 Consumo de $O_2$ base seca para KES/EDC1step/DO. ....	75
Figura 6.32 Consumo de $O_2$ , base seca, para KES/EDC1step/DO ao longo do eixo central..	76
Figura 6.33 Formação de $CO_2$ , base seca, para KES/EDC1step/DO ao longo do eixo central.	76
Figura 6.34 Comparação de temperatura KES <i>versus</i> KER/EDC1step/DO no eixo central....	77
Figura 6.35 Contornos das variáveis temperatura e $O_2$ para KER/EDC1step/DO ao longo do plano de simetria. ....	78
Figura 6.36 Contornos das variáveis: $CO_2$ e velocidade para KER/EDC1step/DO ao longo do plano de simetria. ....	78
Figura 6.37 Comparação do consumo de $O_2$ KES <i>versus</i> KER/EDC1step/DO eixo central ...	79
Figura 6.38 Distribuição de $CO_2$ para o modelo de turbulência KER ao longo do eixo central.	79
Figura 6.39 Distribuição de temperatura KER/EDC_2Step/DO ao longo do eixo central. ....	81
Figura 6.40 Distribuição de $O_2$ para KER/EDC_2Step/DO ao longo do eixo central. ....	82
Figura 6.41 Distribuição de $CO_2$ para KER/EDC_2Step/DO ao longo do eixo central. ....	83
Figura 6.42 Distribuição de CO para KER/EDC_2Step/DO ao longo do eixo central. ....	84
Figura 6.43 Distribuição de $NO_x$ para KER/EDC_2Step/DO ao longo do eixo central. ....	85
Figura 6.44 Contorno de $O_2$ para KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria. ....	86
Figura 6.45 Contorno de $CO_2$ para KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria. ....	87
Figura 6.46 Contorno de NO para KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria. ....	87
Figura 6.47 Contorno de $N_2O$ para KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria. ....	88
Figura 6.48 Velocidade para KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria: ....	88
Figura 6.49 Contorno da temperatura KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria. ....	89
Figura 6.50 Contorno de CO para KER/EDC_2Step/DO ao longo plano de simetria. ....	89
Figura 6.51 Linhas de corrente de temperatura KER/EDC_2Step/DO, plano de simetria. ....	90

Figura 6.52 Distribuição de temperatura para KER/EDC_2Step/DO nos planos radiais. ....	92
Figura 6.53 Distribuição de O <sub>2</sub> para KER/EDC_2Step/DO nos planos radiais. ....	93
Figura 6.54 Distribuição de CO <sub>2</sub> para KER/EDC_2Step/DO nos planos radiais.....	94
Figura 6.55 Distribuição de CO para KER/EDC_2Step/DO nos planos radiais. ....	95
Figura 6.56 Distribuição de NO <sub>x</sub> para KER/EDC_2Step/DO nos planos radiais.....	96
Figura 6.57 Distribuição de temperatura KER/EDC_GRIMech3.0/DO no eixo central. ....	98
Figura 6.58 Consumo de O <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no eixo central.....	99
Figura 6.59 Formação de CO <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no eixo central. ....	100
Figura 6.60 Formação de CO para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no eixo central.....	101
Figura 6.61 Formação de NO <sub>x</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no eixo central. ....	102
Figura 6.62 Contorno de O <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria. ....	103
Figura 6.63 Contorno de CO <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.....	103
Figura 6.64 Contorno de NO para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.....	104
Figura 6.65 Contorno de N <sub>2</sub> O para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria. ....	104
Figura 6.66 Velocidade para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria: .....	105
Figura 6.67 Contorno de temperatura KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria. ..	105
Figura 6.68 Contorno de CO para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.....	106
Figura 6.69 Contorno de OH para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.....	106
Figura 6.70 Linhas de corrente de temperatura para KER/EDC_GRIMech3.0/DO no plano de simetria. ....	107
Figura 6.71 Distribuição de temperatura KER/EDC_GRIMech3.0/DO nos planos radiais. .	109
Figura 6.72 Distribuição de O <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO nos planos radiais. ....	110
Figura 6.73 Distribuição de CO <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.....	111
Figura 6.74 Distribuição de CO para KER/EDC_GRIMech3.0/DO nos planos radiais. ....	112
Figura 6.75 Distribuição de NO <sub>x</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.....	113
Figura 6.76 Comparativo de temperatura entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central. ....	115
Figura 6.77 Comparativo de O <sub>2</sub> entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central. ....	116
Figura 6.78 Comparativo de CO <sub>2</sub> entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.....	116
Figura 6.79 Comparativo de CO entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.....	117
Figura 6.80 Comparativo de NO <sub>x</sub> entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.....	117
Figura 6.81 Comparativo de temperatura entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central. ....	119
Figura 6.82 Comparativo de O <sub>2</sub> entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central. ....	119
Figura 6.83 Comparativo de CO <sub>2</sub> entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.....	120

Figura 6.84 Comparativo de CO entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.....	120
Figura 6.85 Comparativo de NOx entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.....	121
Figura 6.86 Distribuição de temperatura para KER/FRED2step/DO no eixo central.....	122
Figura 6.87 Distribuição de temperatura para KER/FRED2step/DO nos planos radiais.....	123
Figura 6.88 Contorno de temperatura para KER/FRED2step/DO no plano de simetria.....	124
Figura 6.89 Distribuição de NOx para KER/FRED2step/DO no eixo central .....	124
Figura 6.90 Distribuição de CO para KER/FRED2step/DO no eixo central .....	125
Figura 6.91 Comparativo da temperatura entre FREDMod <i>versus</i> FRED no eixo central. ...	126
Figura 6.92 Comparativo de O <sub>2</sub> entre FREDMod <i>versus</i> FRED no eixo central.....	127
Figura 6.93 Comparativo de CO <sub>2</sub> entre FREDMod <i>versus</i> FRED no eixo central. ....	127
Figura 6.94 Comparativo de CO entre FREDMod <i>versus</i> FRED no eixo central.....	127
Figura 6.95 Distribuição de NOx entre FREDMod <i>versus</i> FRED no eixo central. ....	128

## Lista de Tabelas

Tabela 3.1 Emissões NO <sub>x</sub> típicas sem o uso equipamentos de controle (YU, 2008) .....	19
Tabela 4.1 Mecanismos de reação numéricos (GRAÇA, 2012).....	47
Tabela 5.1 Condições experimentais de combustão realizadas (VERÍSSIMO, 2011).....	51
Tabela 5.2 Condições experimentais isotérmicas realizadas (VERÍSSIMO, 2011).....	52
Tabela 6.1 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura para KER/EDC_2Step/DO ..	81
Tabela 6.2 Avaliação do desvio no consumo de O <sub>2</sub> para KER/EDC_2Step/DO .....	82
Tabela 6.3 Avaliação do desvio na formação de CO <sub>2</sub> para KER/EDC_2Step/DO .....	84
Tabela 6.4 Avaliação do desvio na formação de CO para KER/EDC_2Step/DO .....	85
Tabela 6.5 Avaliação do desvio na formação de NO para KER/EDC_2Step/DO .....	86
Tabela 6.6 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura KER/EDC_GRIMech/DO ...	98
Tabela 6.7 Avaliação do desvio no consumo de O <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech/DO .....	99
Tabela 6.8 Avaliação do desvio na formação de CO <sub>2</sub> para KER/EDC_GRIMech3.0/DO ....	100
Tabela 6.9 Avaliação do desvio na formação de CO para KER/EDC_GRIMech3.0/DO.....	101
Tabela 6.10 Avaliação do desvio na formação de NO para KER/EDC_GRIMech3.0/DO ...	102
Tabela 6.11 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura KEE58 e GRIMech3.0.....	115
Tabela 6.12 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura KER/FRED2step/DO .....	122

## Simbologia

### Letras Latinas

$C_{1\mu}$	Constante matemática da equação de transporte dos modelos de turbulência;
$k$	Energia cinética turbulenta (J/kg s) ou ( $m^2/s^3$ );
$y$	Coordenada normal à parede (m);
$l$	Comprimento característico (m);
$x$	Distância ao longo do eixo e coordenadas para determinação de $K_v$ (m);
$K_v$	Fator de recirculação (-);
$\dot{m}$	Vazão mássica (kg/s)

## Simbologia

### Letras Gregas

$\dot{Y}$	Taxa de consumo do combustível no modelo EDC;
$\nu$	Representa a viscosidade cinemática no modelo EDC;
$\chi$	Fator de correção para o fato de que somente as frações suficientemente aquecidas nas pequenas estruturas devem reagir, empregado no modelo EDC;
$\bar{Y}$	Limita a taxa de reação no modelo EDC;
$\tau$	Tempo característico (ms);
$Da$	Número de Damköhler (-);
$\rho$	Massa específica (kg/m <sup>3</sup> );
$\sigma$	Número de Prandtl turbulento (-);
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta (Pa.s);
$\alpha$	Inverso do número de Prandtl turbulento (-)
$u_i$	Velocidade instantânea (m/s);
$\bar{u}_i$	Valor médio para velocidade (m/s);
$u'_i$	Flutuação da velocidade (m/s);
$\Phi$	Diâmetro do orifício (m);
$\lambda$	Coefficiente de excesso de ar (-);
$\delta$	Delta de Kronecker (-)
$\varepsilon$	Dissipação turbulenta (J/kg s) ou (m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> );

## Subscritos

<i>mist</i>	relativo à mistura turbulenta
<i>i</i>	direção do vetor associado ao eixo cartesiano
<i>qui</i>	relativo à reações químicas
<i>f</i>	relativo ao combustível
<i>mix</i>	relativo a região de mistura da reação de combustão
$\varepsilon$	relativo à dissipação turbulenta
<i>k</i>	relativo à energia cinética turbulenta
<i>r</i>	relativo aos produtos recirculados
<i>ar</i>	relativo à entrada do ar de combustão

## Siglas

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CTC	Carga Térmica no Combustor
DO	<i>Discrete Ordinates</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DTM	<i>Discrete Transfer Model</i>
EDC	<i>Eddy Dissipation Concept</i>
EDM	<i>Eddy Dissipation Model</i>
FRCM	<i>Finite Rate Chemistry Model</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MVF	Método dos Volumes Finitos
NO <sub>x</sub>	Óxidos nitrogenados
OH*	<i>Radical quimiluminescente</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier Stokes</i>
VC	Volume de Controle
WSGG	<i>Weighted Sum of Gray Gases</i>
RNG	<i>Renormalization Group</i>

## Capítulo 1

# INTRODUÇÃO

Nestes tempos modernos, um enorme problema ainda presente é a perspectiva de falta no suprimento de energia, apontada exaustivamente por pesquisadores e profissionais da área, seja pelo esgotamento de fontes não renováveis de energia, seja pela ausência de tecnologias acessíveis de economia de energia e aproveitamento de novos recursos. Contudo, diante da dependência de fontes não renováveis de energia, o estudo e o desenvolvimento de tecnologias voltadas para esta aplicação ainda permanece como uma alternativa interessante, pois o uso de novas fontes demandam certamente maior tempo até que a tecnologia atinja níveis aceitáveis no custo da aplicação.

Neste contexto, David Cahen, chefe do departamento de energia do Instituto Weizmann, de Israel, lembra que “... *a coisa mais importante a se fazer nos próximos dez anos é conservar a energia, consumir de modo eficiente. É muito mais barato economizar energia do que gerar energia*”, em sua passagem no II Fórum Global de Sustentabilidade realizado em Paulínia, SP (COUTO, 2011). Neste caso, tal necessidade deve priorizar o estudo dos diversos mecanismos de conversão de energia, de modo a aproveitar eficientemente a energia já disponível. Logo, esta busca por tecnologias mais eficientes, econômicas e também menos poluentes, sem dúvida necessita do desenvolvimento dos processos de combustão.

Inúmeras alternativas para aumento da eficiência do processo de conversão de energia tem sido desenvolvidas, com destaque para a tecnologia empregada em fornos regenerativos, onde parte da energia dos gases é utilizada para pré aquecimento do ar, o que contribui para

redução do consumo de combustível e melhora na eficiência do processo de queima. Contudo, algumas desvantagens são atribuídas a esta tecnologia, principalmente pelo custo elevado dos modernos trocadores de calor que são exigidos, além do aumento na emissão de gases poluentes, sobretudo dos óxidos de nitrogênio ou óxidos nitrogenados,  $\text{NO}_x$ . O termo  $\text{NO}_x$ , comumente empregado entre os pesquisadores, reúne um grupo de compostos, formados por  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  e  $\text{N}_2\text{O}$ , gerados durante o processo de queima (GOMEZ-GARCÍA *et al.*, 2005). Eles contribuem com a poluição atmosférica dependendo dos níveis emitidos, sobretudo através da formação do chamado *smog* fotoquímico, ou seja, uma espécie de nevoeiro contaminado por fumaças, frequente nas grandes cidades. Provocam ainda fenômenos como a chuva ácida e eutrofização dos ecossistemas, sendo também parcialmente responsáveis pela formação de ozônio troposférico, gás que é prejudicial à saúde humana e à produção agrícola (EDP, 2012; SKALSKA, MILLER e LEDAKOWICZ, 2010). A eutrofização corresponde ao aumento excessivo da quantidade de nutrientes presente principalmente na água, ocasionando grande proliferação de algas.

As diversas ações existentes também se devem principalmente aos apelos mundiais de sustentabilidade, bem como aos esforços para redução do consumo de combustíveis de origem fóssil e da emissão de gases poluentes. Até a década de 60, as tecnologias de combustão eram desenvolvidas com objetivo de simplesmente cumprir as necessidades do processo. Contudo, diante da crise do petróleo vivida na década de 70, o desenvolvimento foi voltado para a redução do consumo de combustível, até que nas décadas de 80 e 90, a redução das emissões de poluentes como,  $\text{NO}_x$ , monóxido de carbono,  $\text{CO}$ , combustível não queimado, dióxido de enxofre,  $\text{SO}_2$ , particulados, além de dióxido de carbono,  $\text{CO}_2$ , continuam na vanguarda das pesquisas. Atualmente, tem-se buscado a eficiência energética para um melhor aproveitamento da energia térmica aliado às baixas emissões de poluentes (LACAVALA, 2009).

Existem inúmeras tecnologias empregadas para a redução da emissão de gases poluentes, em destaque evitando a formação de  $\text{NO}_x$ . A combustão pré-misturada pobre, conhecida como *Lean Premixed Combustion* apresenta baixas temperaturas de chama e, conseqüentemente, reduzidas emissões de  $\text{NO}_x$ . Todavia, por estar próximo do limite inferior de inflamabilidade, a estabilidade destas chamas torna-se reduzida, podendo atingir sua extinção, afetando a segurança e confiabilidade dos sistemas. Além disso, as chamas pobres estão muitas vezes associadas à baixas eficiências de combustão, instabilidades acústicas e níveis elevados nas emissões de  $\text{CO}$  e hidrocarbonetos.

Outra tecnologia empregada na redução das emissões de  $\text{NO}_x$  consiste na recirculação

dos gases, composto em parte por aqueles que não reagiram, que ao serem reenviados para a zona de chama possibilitam melhorias na eficiência da combustão (QUARESMA, 2010).

A combustão estagiada é outra tecnologia empregada na redução das emissões de  $\text{NO}_x$ , através da injeção fracionada do combustível e oxidante, criando uma combinação de regiões ricas e pobres. Desta forma, evita-se condições favoráveis de temperatura para a formação de  $\text{NO}_x$ . Com o mesmo objetivo, tecnologias como a oxicombustão e a pós-combustão, são também exemplos de tecnologias empregadas na redução das emissões de  $\text{NO}_x$ .

Diante das diversas soluções apresentadas para redução da emissão de gases poluentes, um novo regime de combustão tem despertado interesse, tanto pela elevada eficiência energética, quanto pelas baixas emissões de poluentes e baixos níveis de ruído da combustão, tornando-se uma alternativa viável (econômica e ambientalmente) aos regimes de combustão convencionais. Os baixos níveis de ruído da combustão são atingidos pela ausência de uma frente de chama definida. Este novo regime, conhecido como Combustão Sem Chama Visível, em razão da ausência de uma região de chama definida e visível a olho nu, revela-se promissor para aplicação no setor industrial, contribuindo principalmente para melhoria da eficiência dos processos de queima e na redução da emissão de poluentes.

Contudo, em razão da sua descoberta recente, no início da década de 1990, suas características e conceitos fundamentais para caracterização e reprodução que são ainda desconhecidos ou indefinidos serão discutidos ao longo deste trabalho, pelo uso de simulações numéricas através da Dinâmica de Fluidos Computacional, CFD, e de dados experimentais de um queimador projetado para este regime.

## **1.1 Objetivos**

### **1.1.1 Objetivo geral**

Analisar o potencial da ferramenta CFD na modelagem do regime de Combustão Sem Chama Visível, comparando os resultados numéricos com dados experimentais de um queimador neste regime, bem como estabelecer procedimentos de modelagem numérica que servirão para sua reprodução. A análise será feita variando os modelos e ajustando suas constantes matemáticas, visando melhor adequação aos dados experimentais disponíveis.

## 1.2 Objetivos específicos

- Reunir os diversos conceitos disponíveis na literatura para a ocorrência do regime de Combustão Sem Chama;
- Investigar os avanços no contexto das simulações numéricas, principalmente quanto aos modelos de combustão, turbulência e radiação empregados na modelagem deste novo regime de combustão;
- Estabelecer um procedimento para simulação numérica deste regime, utilizando o ANSYS Fluent® e ANSYS Workbench®;
- Avaliar os resultados das modificações propostas nas constantes numéricas presentes nos modelos de turbulência e combustão, sugeridas na literatura para modelagem do regime de Combustão Sem Chama Visível;
- Identificar os efeitos dos diferentes modelos numéricos disponíveis no programa ANSYS Fluent® na distribuição de temperatura, na interação turbulência/química e na formação de gases poluentes, através de planos dispostos ao longo do domínio.

## 1.3 Organização do Trabalho

Este trabalho tem início com uma descrição das características principais do regime de combustão Sem Chama Visível ao longo do Capítulo 2, com objetivo de introduzir o leitor ao assunto principal deste trabalho. Em seguida, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre os avanços obtidos nos últimos anos, destacando os principais modelos numéricos empregados, revelando a diversidade de modelos empregados na simulação deste regime.

No Capítulo 3 tem-se uma descrição dos mecanismos responsáveis pela formação dos principais poluentes,  $\text{NO}_x$  e  $\text{CO}$ , que são minimizados com o uso da tecnologia de Combustão Sem Chama Visível, sobretudo em virtude do menor e mais uniforme campo de temperatura obtido.

No Capítulo 4 estão apresentadas as características das técnicas CFD, destacando os principais métodos de discretização e os tipos de malhas numéricas empregados na solução de problemas. Em seguida, são discutidas as diferentes abordagens, DNS/LES/RANS, empregadas na modelagem da turbulência, além dos principais modelos de combustão e

radiação envolvidos nas simulações envolvendo o regime de Combustão Sem Chama Visível. Por último, os mecanismos responsáveis pelas inúmeras reações parciais do processo de combustão, tanto reduzidos quanto detalhados são discutidos, pois fornecem informações precisas acerca dos componentes parciais e para correta previsão dos poluentes formados.

No Capítulo 5 são mostrados os métodos e procedimentos utilizados para obtenção dos dados experimentais, que serão comparados aos resultados numéricos obtidos. Ao longo deste Capítulo, são apresentados dados relativos a diversas condições de medição realizada, ou seja, com a variação do excesso de ar, da temperatura e velocidade do ar de combustão.

No Capítulo 6 são mostrados os resultados numéricos obtidos na tese, iniciando com uma análise da condição de periodicidade e também de independência de malha, empregando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  *Standard*, *KES*, a fim de garantir que os resultados sejam o mínimo afetados com erros do procedimento de simulação. Em seguida são também apresentados os resultados envolvendo o processo de combustão, iniciando com modelo de turbulência *KES* seguindo com modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  *Realizable*, *KER* e de radiação *Discrete Ordinates*, *DO* nos demais casos investigados. As primeiras simulações envolvendo o processo de combustão empregaram mecanismo global de reação em um passo, seguido pela reação em dois passos, com mecanismo de reação detalhada e por último reduzida. Os resultados mostraram que o detalhamento do processo de combustão é fundamental para uma adequada definição do perfil de temperatura, de espécies química e dos poluentes formados. Porém, os resultados numéricos com mecanismos reduzidos mostraram a possibilidade de se obter resultados próximos àqueles com elevado detalhamento cinético em apenas 1/3 do tempo. Com relação à formação de poluentes, no caso monóxido de carbono, CO, e óxidos nitrogenados, NO<sub>x</sub>, ajustes nas constantes matemáticas são imprescindíveis, pois mesmo com detalhamento químico os resultados não foram bons quanto ao teor formado dos mesmos.

Finalmente, no Capítulo 7 são descritas as conclusões obtidas neste trabalho bem como sugestões de atividades à serem desenvolvidas.

## Capítulo 2

# REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são apresentados inicialmente alguns aspectos importantes do regime de Combustão Sem Chama Visível, destacando os avanços numéricos obtidos na modelagem deste regime.

### 2.1 Características do Regime de Combustão Sem Chama Visível

Melhorias na eficiência do processo de combustão e nas emissões de gases poluentes são um dos pontos chave nas pesquisas em combustão (GALLETTI *et al.*, 2007). Logo, considerando que o aumento das emissões de  $\text{NO}_x$ , sobretudo de NO via mecanismo térmico, está intrinsecamente relacionado com a temperatura, conforme sugerido pela Equação 2.1, apresentada por Glarborg (1993) *apud* Lacava (2000), onde as concentrações estão em  $\text{mols/cm}^3$  e a temperatura em Kelvin, torna-se fundamental o controle da formação de NO térmico evitando os picos de temperatura (LACAVA, 2000).

De acordo com Lacava (2000), a integração da Equação 2.1 promove uma boa aproximação da formação do NO térmico sobre condições de combustão com excesso de ar, alta temperatura e baixa concentração relativa de NO.

Maiores detalhes serão discutidos no Capítulo 3, destinado exclusivamente aos mecanismos de formação dos poluentes.

$$\frac{d[NO]}{dt} = 1,3 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-67650}{T}\right) [N_2][O_2]^{0,5} \quad (2.1)$$

O regime de Combustão Sem Chama Visível constitui uma das tecnologias desenvolvidas para redução das emissões de  $NO_x$ , cuja operação está mostrada na Figura 2.1. Nela, pode-se observar o surgimento do regime à medida que o teor de diluição é variado, no caso pelo aumento do teor de  $N_2$  e  $CO_2$ . Este procedimento reproduz uma condição necessária para existência do fenômeno, através da recirculação de produtos e inertes, que distribui a combustão ao longo do queimador, eliminando a existência de uma frente de chama definida. Neste caso, dentre outros motivos, a chama não permanece visível (SZEGÖ, 2010).

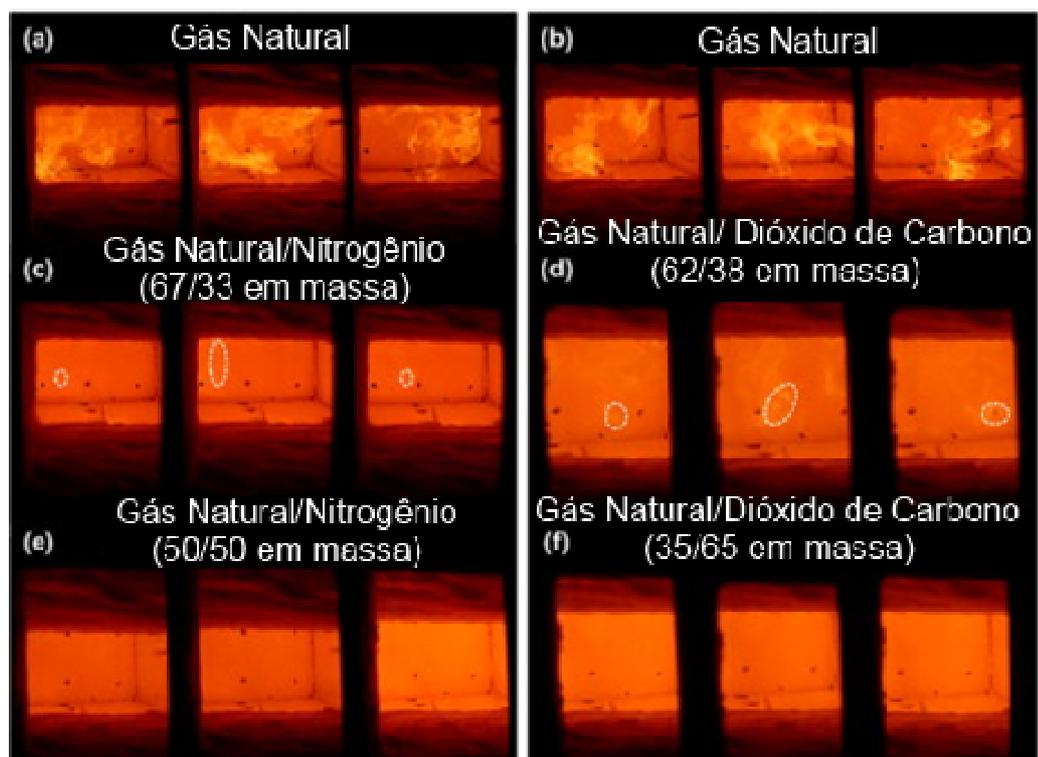


Figura 2.1 Sequência de imagens instantâneas da queima de gás natural com diluição progressiva de  $N_2$  e  $CO_2$  (SZEGÖ, 2010).

A descoberta da Combustão Sem Chama Visível teve início em meados da década de 90 no Japão, durante pesquisas para o desenvolvimento de novas tecnologias para os fornos com pré aquecimento do ar. Basicamente, a finalidade era injetar o ar de combustão altamente pré aquecido ( $1200\text{ }^\circ\text{C}$ ) com elevada velocidade, resultando em uma menor concentração de oxigênio pela recirculação dos produtos da combustão (VERÍSSIMO, 2011). Porém, o autor

comenta que Wüning (2000) sustenta a descoberta deste regime e que ocorreu ao acaso, durante testes realizados em fornos regenerativos. Entretanto, tal descoberta foi resultado de incentivos do governo japonês para melhorar o cenário econômico vivido na época. As temperaturas do forno eram superiores a 1000 °C e o ar de combustão acima de 650 °C, sem presença de chama, apesar do combustível ser completamente consumido.

Outras denominações também são empregadas para descrever este regime de combustão, tais como *FLameless OXidation* (FLOX®), *MILD Combustion*, *High Temperature Combustion Technology* (HiCOT) e *High Temperature Air Combustion* (HiTAC) (RAFIDI, 2005).

## 2.2 Conceitos Principais

A definição precisa dos conceitos e das características que envolvem o regime de combustão Sem Chama Visível é objeto de muitas discussões entre os pesquisadores, grande parte pelo caráter inovador desta tecnologia, a começar pelo nome. Existem variadas definições para o regime de combustão Sem Chama Visível, porém Wüning (2005) sintetiza como: “*Uma combustão estável sem a presença de chama e com uma recirculação bem definida dos produtos da combustão...*”.

Ayoub *et al.* (2012) e Wüning & Wüning (1997) reúnem as características do regime de combustão Sem Chama Visível, em comparação com a combustão convencional, como reduzido ruído da combustão, liberação uniforme de calor e estrutura da chama não visível, embora possam ocorrer zonas de reação transitórias, que surgem ou desaparecem momentaneamente.

O princípio da elevada recirculação dos gases da combustão provoca uma diluição progressiva da mistura (oxidante, combustível e produtos de combustão) na zona de combustão, e conseqüentemente reduz a ocorrência dos picos de temperatura (LUPANT *et al.*, 2007). Por esse motivo, ela pode ser representada por um conjunto de reatores ideais, perfeitamente misturados, conhecidos na literatura como *stirred reactor* ou *plug flow ones*.

Dentre outros fatores, esta alta taxa de recirculação é resultado do momento criado pelos jatos de ar e combustível injetados na câmara de combustão (FLAMME, 2004; WÜNNING & WÜNNING, 1997). Esta elevada recirculação dos gases quentes também reduz a concentração de oxigênio e conseqüentemente os gradientes de temperatura na região de

reação, evitando a formação do  $\text{NO}_x$  pela via térmica. Segundo Mancini *et al.* (2007), a presença de oxigênio identificada neste regime esteve na ordem de 3 % a 5 %. Por último, a recirculação recupera parte da energia contida nos produtos da combustão, aquecendo o fluxo de ar na entrada (COLORADO *et al.*, 2010).

Devido a reduzida presença de oxigênio no interior da câmara, a temperatura média do processo de combustão neste regime é menor e a distribuição de temperatura mais homogênea que uma chama convencional, isto é, os gradientes de temperaturas são reduzidos. Além disso, o processo de combustão é mantido estável tanto pela injeção dos reagentes quanto pela temperatura interna do queimador mantidos acima da autoignição da mistura (CAVALIERE & JOANNON, 2004; VILLERMAUX *et al.*, 2008). Contudo, outros pesquisadores obtiveram o regime de Combustão Sem Chama Visível com temperatura do ar de combustão mais baixas, porém após o interior do queimador ser mantido sob temperaturas elevadas, indicando que o interior da queimador deve estar com elevada temperatura e não apenas a temperatura de injeção dos reagentes.

A Figura 2.2 mostra um resultado de uma medição do nível de ruído e das emissões de  $\text{NO}_x$  de um queimador Sem Chama Visível em comparação com uma queima convencional e uma chama descolada, do inglês *lifted-flame*. Nota-se que o nível de ruído reduziu 16 % e as emissões atingiram cerca de 4 % do valor para chama convencional.

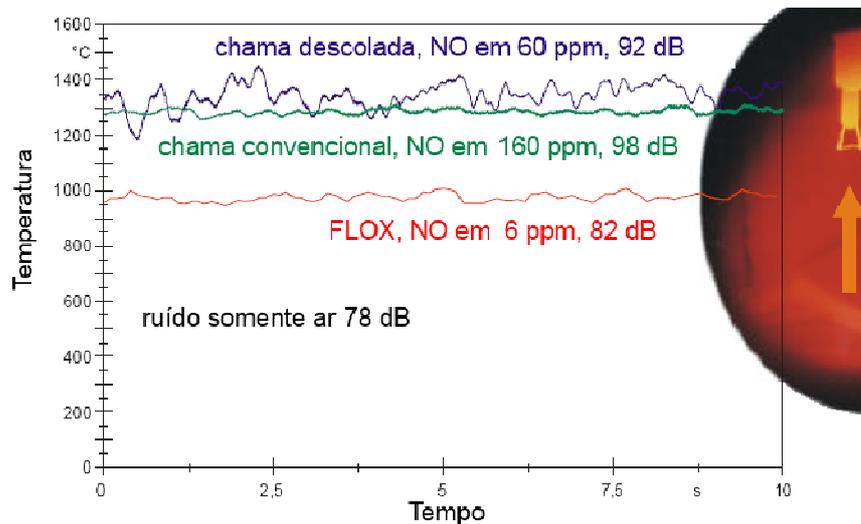


Figura 2.2 Níveis de ruído e emissão de  $\text{NO}_x$  na combustão Sem Chama Visível (WÜNNING, 2003).

Pelo fato do desenvolvimento do regime ter iniciado em fornos regenerativos, com elevada temperatura para o ar de combustão, Ayoub *et al.* (2012) comentam que a exigência

de ar pré aquecido foi considerado inicialmente como requisito para obtenção do regime de combustão Sem Chama Visível, embora os autores obtiveram tal regime com aquecimento moderado do ar de combustão, reduzindo ainda mais fortemente as emissões de  $\text{NO}_x$ .

Dentre as diversas características do regime de combustão Sem Chama Visível, Ayoub *et al.* (2012) resumem claramente que um queimador para esta tecnologia tem uma configuração específica, na qual as características aerodinâmicas produzidas pelos injetores garantem diluição e aquecimento dos reagentes, com ou sem preaquecimento do ar na injeção, pela recirculação dos produtos quentes da combustão. Esta recirculação dos produtos quentes irá garantir características moderadas e suaves, do inglês *mild*, na zona de reação onde ocorrerá a principal liberação de calor.

Masson (2005) comenta que o pré aquecimento do ar de combustão não é uma condição necessária, porém devem existir condições aerodinâmicas criadas pelos fluxos de ar e combustível, de modo a garantir que a recirculação obtenha baixas concentrações de  $\text{O}_2$  na mistura de combustível, ar e gases de combustão, e também que a temperatura nas paredes do forno seja ligeiramente maior do que o temperatura de autoignição do combustível a ser utilizado.

A Figura 2.3 compara os diversos regimes de combustão a partir do teor de oxigênio e pela temperatura dos reagentes. Nota-se que a redução na disponibilidade de oxigênio aliado à elevada temperatura dos reagentes garantem a presença do regime de combustão Sem Chama Visível.

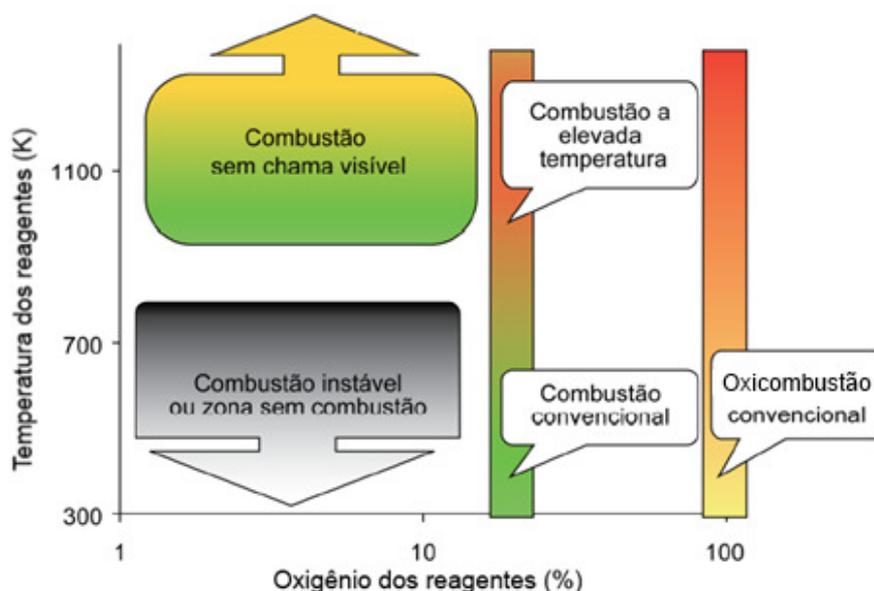


Figura 2.3 Regimes de combustão em função da temperatura de pré-aquecimento do ar e teor de oxigênio (RAFIDI, 2005).

Outra característica do regime de Combustão Sem Chama Visível está no modo de injeção do combustível e do oxidante, que ocorre de modo separado, relativamente distante, com elevadas velocidades, a fim de atingir níveis elevados para recirculação aerodinâmica dos gases, além de uma reduzida concentração de oxigênio (COLORADO *et al.*, 2010).

Uma comparação entre o processo de combustão convencional e a combustão Sem Chama Visível pode ser visto na Figura 2.4, que apresenta o esquema: (a) combustão convencional e (b) combustão sem chama visível. Observa-se a existência de uma frente de chama com elevadas temperaturas, que desaparece na queima sob regime Sem Chama Visível. Contudo, nas diversas pesquisas de Wüning (2003), não é mencionado o local da medida de temperatura, o que torna esta condição ideal.

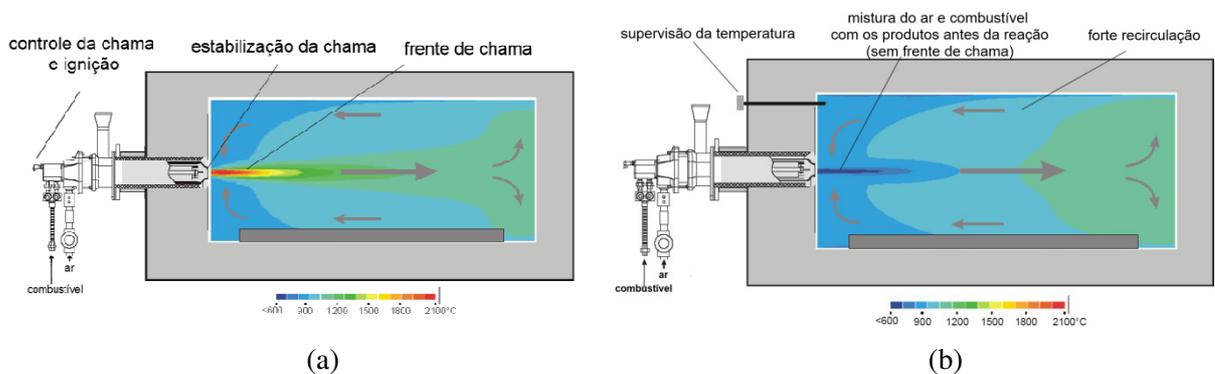


Figura 2.4 Comparativo entre processos de combustão:  
(a) convencional e (b) Sem Chama Visível (WÜNNING, 2003).

Mi *et al.* (2009) investigaram a influência do momento de injeção ar/combustível para obter o regime de combustão Sem Chama Visível em uma fornalha de 20 kW recuperativa, estabelecendo um valor crítico de  $0,097 \text{ kg/ms}^2$  acima do qual tal regime ocorre. Na Figura 2.5, pode-se observar o regime de combustão Sem Chama Visível ocorrendo a medida que se atingiu a temperatura de autoignição e recirculação interna.



(a) chama "fria"



(b) chama "quente"



(c) sem chama visível

Figura 2.5 Imagens de uma chama difusa até a obtenção do regime Sem Chama Visível  
(MI *et al.*, 2009).

Mohamed e Hmaeid (2012) afirmaram que em chamas convencionais a cinética química ocorre mais rapidamente que a taxa de mistura dos reagentes, contrariamente ao regime de combustão Sem Chama Visível onde a combustão é controlada por ambos. Isto torna difícil o processo de simulação numérica, considerando que os modelos disponíveis são adaptados, a priori, às chamas convencionais.

Um forte indicativo do regime de combustão Sem Chama Visível é a presença do radical  $\text{OH}^*$ , como mostra a Figura 2.6. Na parte superior desta figura, nota-se uma zona intensa formada pelo radical  $\text{OH}^*$ , localizada próxima ao bico injetor, o que revela uma região de chama mais definida, contrariamente a imagem inferior, cuja distribuição do radical  $\text{OH}^*$  permanece mais dispersa, conforme ilustrado pelo contorno da região na Figura 2.6.

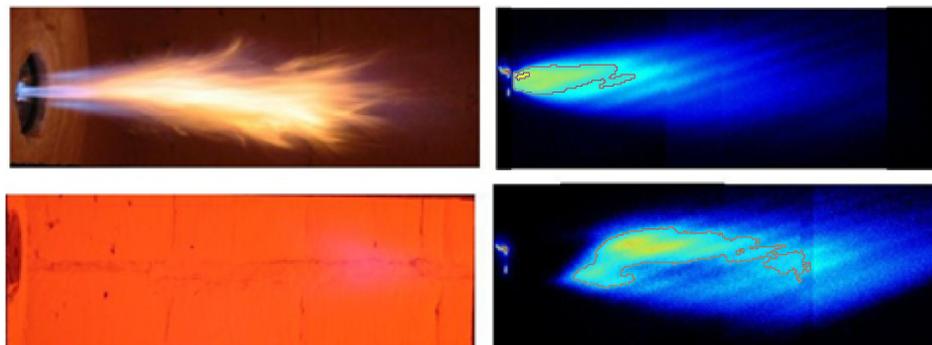


Figura 2.6 Combustão Sem Chama Visível identificada pelo radical  $\text{OH}^*$   
(LEICHER; GIESE, 2012).

A estabilidade do regime de Combustão Sem Chama Visível está fortemente ligada ao tipo de combustível, à temperatura da reação e ao fator de recirculação,  $K_p$ . Este último representa uma razão entre a vazão mássica de gases recirculados na direção do bico injetor pela vazão mássica de ar mais combustível injetados no queimador (WÜNNING & WÜNNING, 1997; EFFUGI, GELOSA & DERUDI, 2008).

Segundo Colorado *et al.* (2010), se o fator de recirculação é mantido entre 0 e 3, juntamente com uma temperatura da câmara acima da autoignição do combustível em um queimador operando com metano, tem-se uma chama do tipo convencional. No caso variar o fator de recirculação para uma faixa entre 3 e 4,5, se inicia um processo de transição para o regime de combustão Sem Chama Visível, sendo caracterizado por picos na formação do CO. Finalmente, ultrapassando o valor de 4,5 para o fator de recirculação, nota-se um decréscimo acelerado da formação de  $\text{NO}_x$  térmico. Por último, para valores do fator de recirculação acima de 10, tem-se uma região novamente instável, com níveis de  $\text{NO}_x$  ainda a níveis baixos, porém com picos na formação do CO.

Os valores apresentados anteriormente para o fator de recirculação devem ser investigados criteriosamente, considerando que a obtenção do regime de combustão Sem Chama Visível é fortemente dependente dos mesmos (VERÍSSIMO *et al.*, 2012). Desta forma, conclui-se que um fator  $K_v$  expressivo é necessário para reduzir a disponibilidade de oxigênio e melhorar o processo de mistura. Na tentativa de calcular o valor de  $K_v$ , Battaglia *et al.* (2008) confirmaram experimentalmente a Equação 2.2 proposta por Beer & Chigier (1972):

$$K_v = 0,32 \left( \frac{x}{d} \right) \sqrt{\frac{\rho_{\text{interior}}}{\rho_{\text{ar}}}} \quad (2.2)$$

sendo  $d$  correspondente ao diâmetro do injetor e  $x$  a coordenada do eixo.

A seguir, serão apresentadas as principais pesquisas no âmbito numérico, utilizadas no processo de modelagem do regime de combustão Sem Chama Visível.

## 2.3 Modelagem Numérica do Regime de Combustão Sem Chama Visível

Diante do interesse do setor industrial pela tecnologia de combustão Sem Chama Visível, diversas pesquisas têm sido realizadas ao redor do mundo, representadas não somente de maneira experimental, mas também de forma numérica, geralmente através das técnicas da Dinâmica de Fluidos Computacional. Tais técnicas, geralmente conhecidas apenas como CFD (*Computational Fluid Dynamics*), tem sido cada vez mais empregadas no projeto de queimadores, resultando em melhorias na geometria, na configuração e na posição dos injetores, quando se deseja a recirculação dos gases internos (GALLETTI *et al.*, 2007).

Atualmente, a maioria das pesquisas numéricas visando o conceito de combustão Sem Chama Visível aplicam a modelagem matemática RANS (*Reynolds averaged Navier Stokes*), com clara divergência quanto aos modelos de turbulência e/ou interação combustão e turbulência adequados a este regime (MANCINI *et al.*, 2007). Contudo, autores como Minamoto & Swaminathan (2014) tem modelado este regime através de simulações DNS (*Direct Numerical Simulation*), enquanto Kulkarni & Polifke (2012) tem investigado simulações com LES (*Large Eddy Simulation*), obtendo ambos resultados precisos, porém

com elevado custo computacional.

Apesar da homogeneidade da chama e dos gradientes moderados estarem presentes neste modo de combustão, a combustão Sem Chama Visível parece mais difícil de ser modelada do que chamas convencionais. Isto se deve tanto pela elevada diluição, observada pelos gradientes de temperaturas relativamente pequenos, o que reduz as taxas de reação química, quanto pela característica de um fenômeno turbulento pela forte recirculação observada. Portanto, a reprodução adequada das interações turbulência-química revela-se um ponto crucial no processo de modelagem deste regime (GALLETTI *et al.*, 2007).

De acordo com Lupant *et al.* (2007), assumir na modelagem numérica que a taxa de reação ocorre de forma rápida, isto é, a velocidade com que as reações químicas se desenvolvem como nas chamas convencionais, consiste num grave erro. Cavaliere e Joannon (2004) sugerem que o regime pode ser descrito com uma combustão estagiada, na qual a primeira parte deve ser rica e a segunda repleta de gases inertes.

Coelho & Peters (2001) simularam a operação de uma fornalha no regime de combustão Sem Chama Visível, descrevendo as interações turbulência/química através da biblioteca *flamelet*. Os resultados apresentaram algumas discrepâncias com relação aos dados experimentais, principalmente em termos do tempo de residência, que foi subestimado pela análise numérica. Por outro lado, a formação de NO apresentou valores bem próximos, mostrando que a biblioteca *flamelet* pode ser empregada.

Orsino *et al.* (2001) investigaram três modelos de combustão, *Eddy break-up*, EDM com equilíbrio químico e *PDF/Mixture Fraction*, na queima do gás natural com elevada temperatura do ar de combustão. Em resumo, todos os modelos falharam na previsão dos resultados em torno da região de injeção de combustível. Christo e Dally (2005) mostraram que a junção Flamelet/PDF não caracterizou de maneira adequada o regime, bem como o modelo de combustão EDM.

Murer *et al.* (2005) verificaram experimentalmente e numericamente a combustão Sem Chama Visível para o gás natural em um queimador de 30 kW. Dentre outras análises, os autores verificaram a influência do excesso de ar, da temperatura da fornalha e do pré-aquecimento do ar de entrada na zona de combustão no regime. O modelo de turbulência empregado foi o *k-ε Standard*, assumindo tratamento padrão na parede, apesar de terem sido testados outros modelos como *k-ε Realizable (KER)*, e *Reynolds Stress Model (RSM)*, resultando em valores próximos do modelo *k-ε Standard*. Para o modelo de combustão, foi empregado em conjunto o modelo EDM junto com FRCM. Os autores afirmam que o modelo

EDM, não considera nenhuma limitação em termos de cinética química. Já os modelos que utilizam a ferramenta PDF (*Probability Density Function*), são baseados nas equações de transporte para a variação da fração de mistura, que é função tanto da temperatura, da composição dos gases quanto dos valores da fração de mistura através do equilíbrio químico. Após uma comparação dos modelos de combustão, os modelos PDF forneceram valores incoerentes para a concentração de CO, ao contrário do modelo EDM, que esteve próximo dos valores obtidos para o caso EDM/FRCM. As maiores diferenças do modelo EDM foram observadas nas proximidades do injetor, pois sem qualquer limitação de cinética química, a combustão tem início logo na entrada, o que leva a zona de reação muito próxima dos injetores.

Galletti *et al.* (2007) realizaram um estudo experimental preliminar e numérico em um queimador operando no regime de combustão Sem Chama Visível, de modo a identificar algumas condições de operação, tais como, a distribuição de temperatura ao longo do eixo central do queimador, taxas de diluição e emissões de NO<sub>x</sub> durante a queima do metano e também com enriquecimento por hidrogênio. Foram incorporadas duas subrotinas ao modelo ANSYS Fluent®, para melhor representar a seção recuperativa e as trocas de calor por radiação com o meio. As equações RANS foram resolvidas usando o modelo de turbulência *k-ε Standard* modificado, onde a constante matemática C<sub>ε1</sub> foi atribuída como 1,6 ao invés do valor padrão de 1,44, a fim de corrigir algumas deficiências do modelo *Standard* em prever pequenas recirculações do escoamento. Quanto ao modelo de combustão, os autores empregaram uma combinação dos modelos *Eddy Dissipation Model* (EDM), com *Finite Rate Chemistry Model* (FRCM), pelo fato de considerar conjuntamente tanto os fenômenos químicos quanto de natureza turbulenta. O modelo de radiação empregado foi o *Discrete Transfer*, com um número de raios igual a 16. Além disso, o coeficiente de absorção foi calculado pelo parâmetro WSGG (*Weighted Sum of Gray Gases*), com coeficientes propostos por Smith *et al.* (1982) *apud* Aminian *et al.* (2012). Os resultados numéricos obtidos por Galletti *et al.* (2007) foram bons, revelando que os modelos são coerentes. Foram feitas também pelos autores simulações com o modelo de turbulência *k-ε Standard*, sendo constatado que o modelo subestimou o grau de recirculação entre 2 % a 4 %, reforçando que as alterações nos parâmetros do modelo são necessárias.

Lupant *et al.* (2007) investigaram experimentalmente um queimador em escala laboratorial operando com gás natural, através do campo de temperaturas e espécies químicas detalhadas. Foram também realizadas simulações numéricas com ANSYS Fluent® com

objetivo de verificar os modelos mais adequados na modelagem do regime de combustão Sem Chama Visível. Os modelos numéricos empregados foram baseados em trabalhos anteriores, sendo para turbulência o *k-ε Standard* com tratamento de parede padrão. Para radiação foi utilizado o DO, com 4x4 sólidos por octeto, e coeficiente de absorção baseado na técnica WSGG. Para combustão foram empregados os modelos *Eddy Dissipation/Finite Rate* com constantes A e B modificadas, considerando que a taxa de reação no ED controlada pela turbulência e no FR pela expressão de Arrhenius, sem flutuações de turbulência. Os autores concluíram que as modificações feitas no modelo ED/FR tiveram boa concordância com os dados experimentais, pois as temperaturas estiveram menores após as modificações nas constantes. Contudo, valores de CO permaneceram elevados em relação aos dados experimentais, sugerindo que outros modelos de combustão sejam investigados, tais como, o EDC e o PDF-*Flamelet Model*.

Frassoldati *et al.* (2010) analisaram matematicamente e numericamente um queimador do tipo JHC (*Jet in Hot CoFlow*), projetado para o regime de combustão Sem Chama Visível. Segundo os autores, JHC corresponde a uma teoria sobre jatos com a capacidade de prever o comportamento e a estrutura de chamas, permitindo o levantamento dos parâmetros característicos do regime de combustão Sem Chama Visível. Foram testados os modelos de combustão, EDC, de radiação DO com WSSG e de turbulência *k-ε Standard* modificado. Os autores verificaram o comportamento do regime com aumento gradativo na porcentagem de O<sub>2</sub> na região *CoFlow*, verificando que a combustão ocorre mais diluída e mais intensa de acordo com o teor de O<sub>2</sub>. Foi observado ainda nas condições de entrada, que o parâmetro *k*, que representa a energia cinética turbulenta, está relacionado com processo de difusão do O<sub>2</sub>, ou seja, para valores de *k* menores, o processo de difusão também esteve reduzido, existindo um valor de *k* ideal aos resultados experimentais. Indiretamente, isto também está relacionado com a intensidade da turbulência atribuída na região de entrada do queimador. Finalmente, os autores afirmaram que mecanismos detalhados apresentam melhores resultados comparados aos globais ou *skeletal*s, porém, caso níveis elevados de NO ainda ocorram, pode estar relacionado com a presença de picos elevados de temperatura, não caracterizando desta forma deficiências do modelo numérico.

Aminiam *et al.* (2012) analisaram numericamente um queimador JHC, verificando quatro variações dos modelos de turbulência *k-ε*, isto é, *Standard*, Modificado, *Realizable* e RNG, além do modelo RSM. Para combustão, foram estudados o EDC modificado, juntamente com mecanismos de reação do tipo KEE58, DRM19 e DRM22. Os autores

desenvolveram um procedimento para análise, visando identificar a influência de cada componente no resultado final. No início, foram verificados as condições de contorno em termos dos parâmetros de turbulência  $k$  e  $\varepsilon$ , além de um estudo de independência de malha. Em seguida, foram testados os modelos de cinética e de turbulência, constatando ainda a presença de temperaturas elevadas. Finalmente, foram verificados os modelos de combustão, dos quais, o modelo EDC modificado apresentou melhor concordância com os resultados experimentais disponíveis.

Diante das pesquisas apresentadas, o uso das técnicas CFD estão presentes no desenvolvimento do regime de Combustão Sem Chama Visível, seja através de comprovações dos resultados experimentais obtidos quanto no entendimento das características. No entanto, foi constatado pela revisão bibliográfica um grande número de modelos sugeridos e que já apresentaram boa concordância com os dados experimentais.

Contudo, pelo fato das características deste regime de combustão ainda estarem em desenvolvimento, pesquisadores tem obtido o regime em condições diferentes, por exemplo, sem pré aquecimento do ar, uma das premissas básicas imposta por Wüning e Wüning (1997) no início da descoberta. Em princípio, esta variedade de meios de obtenção resulta não apenas em um conjunto de modelos numéricos próprios para modelagem do regime de combustão Sem Chama Visível, mas de diversas combinações conforme pode ser observado na revisão bibliográfica realizada.

Diante do que foi apresentado, este trabalho reúne uma investigação das combinações dos modelos numéricos para uma fornalha em escala laboratorial, apresentada experimentalmente por Veríssimo (2011), verificando o uso da ferramenta CFD na modelagem deste regime de combustão. Neste sentido, futuros estudos numéricos neste queimador poderão ser investigados fornecendo resultados mais próximos do comportamento físico real e ampliando o conhecimento desta tecnologia.

## Capítulo 3

# MECANISMOS DE FORMAÇÃO DE POLUENTES

Ao longo deste capítulo, serão descritos os mecanismos ou rotas de formação de óxidos nitrogenados, denominados por  $\text{NO}_x$ , formados durante o processo de combustão, além de uma discussão sobre os efeitos nocivos aos seres humanos e ao meio ambiente. São também apresentados as principais características e etapas de formação do monóxido de carbono, CO.

### 3.1 Introdução

Ao longo dos últimos anos, o conhecimento e o desenvolvimento de tecnologias ligadas à redução das emissões de gases poluentes tem ganhado destaque. Isto se deve aos novos limites cada vez mais restritos estabelecidos, que necessariamente, exigem pesquisas de tecnologias voltadas aos processos combustão.

No processo de combustão, são produzidos diversos gases, dos quais os óxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ), monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não queimados, dióxidos de enxofre ( $\text{SO}_2$ ) e material particulado, são os principais (TURNNS, 2000).

Na Tabela 3.1 estão mostradas emissões típicas de caldeiras movidas a gás natural e óleo combustível. Nota-se que, sem nenhum equipamento de controle, as emissões de poluentes, sobretudo  $\text{NO}_x$ , são elevadas. Segundo Yu (2008), métodos de prevenção da formação de  $\text{NO}_x$  possuem custo menor que o uso de métodos de remoção posterior dos gases

poluentes. Isto revela a importância do estudo dos mecanismos de formação, a fim de desenvolver tecnologias que minimizam a formação de poluentes.

Tabela 3.1 Emissões NO<sub>x</sub> típicas sem o uso equipamentos de controle (YU, 2008)

Combustível	Caldeira	Emissões NO <sub>x</sub> (ppm, 3% O <sub>2</sub> )
Gás natural	flamotubular	75-115
	aquatubular ( <i>skid</i> )	40-90
	aquatubular (field erected)	45-105
Óleo nº 2	flamotubular	70-140
	aquatubular ( <i>skid</i> )	90-150
	aquatubular (field erected)	40-115
Óleo nº 4	flamotubular	160-310
	aquatubular ( <i>skid</i> )	140-190
Óleo nº 6	flamotubular	200-360
	aquatubular ( <i>skid</i> )	190-330

Dentre os poluentes citados anteriormente, o CO e o NO<sub>x</sub> serão abordados a seguir com maiores detalhes, principalmente pela relevância no regime de combustão Sem Chama Visível.

## 3.2 Monóxido de Carbono

O monóxido de carbono consiste em um gás inodoro, incolor e insípido, mas altamente tóxico, presente como espécie intermediária nos processos de combustão. Dentre os efeitos do monóxido de carbono na saúde humana está sua capacidade de se combinar irreversivelmente com a hemoglobina, prejudicando o transporte de oxigênio pelo sangue. Quanto à toxicidade, observa-se uma variação segundo o tempo de exposição e a concentração inalada. A oxidação do CO ocorre simplificada em quatro etapas (TURNES, 2000).



### 3.3 Óxidos de Nitrogênio

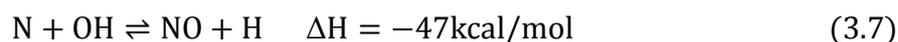
A denominação habitual dos óxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_x$ ), abrange tanto os óxidos nítricos ( $\text{NO}$ ), dióxidos de nitrogênio ( $\text{NO}_2$ ) e os óxidos nitrosos ( $\text{N}_2\text{O}$ ), cujos detalhes de formação são abordados a seguir.

### 3.4 Formação de $\text{NO}_x$

Os processos de combustão são controlados basicamente pelas Leis da Dinâmica dos Fluidos, da Termodinâmica e pela composição do combustível a ser queimado (CAVALIERE & JOANNON, 2004). Contudo, a formação dos óxidos nitrogenados ocorre durante a maioria dos processos de combustão, através de quatro principais mecanismos (MARTINS & FERREIRA, 2010).

#### 3.4.1 Mecanismo térmico ou de Zeldovich

A formação de  $\text{NO}$  proveniente do mecanismo térmico é resultado da oxidação do nitrogênio presente no ar atmosférico a altas temperaturas, juntamente com tempos de residência relativamente longos (TURNS, 2000; MARTINS & FERREIRA, 2010). Esta formação é representada por um conjunto de reações químicas propostas por Zeldovich, tais como:



De acordo com o mecanismo de Zeldovich, a taxa de formação de  $\text{NO}$  é muito mais lenta que a taxa das reações de combustão, sendo que a maioria do  $\text{NO}$  é formada após as etapas iniciais de combustão. Por isso, a formação de  $\text{NO}$  térmico pode ser desacoplada do processo de combustão e sua taxa de formação calculada assumindo equilíbrio das reações de combustão (ANSYS INC., 2011). Diante deste fato, o uso de técnicas como *post-processing* podem ser utilizadas nas simulações, gerando economia no tempo de processamento.

Diante da forte ligação da formação do NO<sub>x</sub> térmico com a temperatura, as técnicas empregadas no projeto de queimadores visam normalmente:

- Eliminar ao máximo os picos de temperatura;
- Manter o tempo de residência baixo, principalmente nas áreas onde se concentram elevadas temperaturas;
- Evitar a concentração de elevadas taxas de oxigênio, principalmente nas regiões de elevadas temperaturas.

Para a determinação das quantidades de NO formado via mecanismo térmico durante o processo de combustão, o programa ANSYS Fluent® emprega as taxas de reação mostradas nas expressões de 3.8 a 3.10.

$$k_{f,1} = 1,8x10^8 e^{-38370/T} \quad k_{r,1} = 3,8x10^7 e^{-425/T} \quad (3.8)$$

$$k_{f,2} = 1,8x10^4 e^{-4680/T} \quad k_{r,2} = 3,81x10^3 T e^{-20820/T} \quad (3.9)$$

$$k_{f,3} = 7,1x10^7 e^{-450/T} \quad k_{r,3} = 1,7x10^8 e^{-24560/T} \quad (3.10)$$

As unidades das constantes de reação acima estão em m<sup>3</sup>/mol.s.

A expressão para cálculo do NO via mecanismo térmico empregada pelo ANSYS Fluent® é mostrada na expressão 3.11, cujas concentrações estão em mol/m<sup>3</sup>.

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} = & k_{f,1}[O][N_2] + k_{f,2}[N][O_2] + k_{f,3}[N][OH] - k_{r,1}[NO][N] - k_{r,2}[NO][O] \\ & - k_{r,3}[NO][H] \end{aligned} \quad (3.11)$$

Analisando a expressão 3.11, observa-se que a obtenção da taxa de formação de NO exige a definição das concentrações de O, H e OH. Caso a simulação não forneça tais concentrações, sobretudo nos casos envolvendo reações globais, onde são conhecidos espécies como CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O, o ANSYS Fluent® sugere algumas hipóteses para a escolha do usuário, conforme mostrado a seguir.

#### a) Hipótese 1: quase-permanente para o teor de nitrogênio [N]

Segundo ANSYS Fluent®, a taxa de formação de NO é significativa em altas temperaturas (superiores a 1800 K), porque a fixação do nitrogênio atmosférico requer o

rompimento de um ligação tripla entre os átomos, dificultando o processo. Este efeito é representado pela alta energia de ativação da reação 3.5, que o torna limitador do mecanismo de Zeldovich. No entanto, a energia de ativação envolvendo átomos de nitrogênio é menor, conforme mostrado na reação 3.6 . Assim, quando existe oxigênio suficiente, por exemplo em chamas pobres de combustível, chamadas *fuel lean*, a taxa de consumo de átomos de nitrogênio livres torna-se igual à velocidade da sua formação e, portanto, um estado quase permanente pode ser estabelecido. Este pressuposto é válido para a maioria dos casos de combustão, exceto em condições de combustão extremamente rica em termos de combustível. Neste caso, a taxa de formação de NO, em  $mol/m^3 s$ , pode ser obtida pela expressão 3.12:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{f,1}[O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{2k_{r,1}k_{r,2}[NO]^2}{k_{f,1}[N_2]k_{f,2}[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{r,1}[NO]}{k_{f,2}[O_2] + k_{f,3}[OH]}\right)} \quad (3.12)$$

De acordo com a expressão 3.12, nota-se que a taxa de formação de NO térmico varia com aumento da concentração de oxigênio e que a formação do poluente dobra a cada acréscimo de 90 K de temperatura, em condições próximas de 2200 K, com base na expressão 3.8 (ANSYS INC., 2011).

### **b) Hipótese 2: dissociar NO térmico da combustão**

Segundo o mecanismo de Zeldovich, é possível dissociar os cálculos do processo de combustão daqueles envolvendo a formação de NO térmico. Desta forma, o ANSYS Fluent® assume valores de equilíbrio para temperatura, demais espécies químicas, além de concentrações de O e OH. Contudo, os valores instantâneos do radical O são na verdade maiores que aqueles considerados no equilíbrio, segundo ANSYS Fluent®. Desta forma, isto resulta na previsão de menores valores para a formação de NO térmico.

De modo a superar este possível erro, deve-se modelar a processo de combustão com inúmeras espécies e etapas intermediárias de reação, afim de obter concentração de O mais coerentes. Como a simulação envolvendo cinética detalhada acarreta um longo tempo computacional, o ANSYS Fluent® sugere três métodos para estimar a concentração do radical O: equilíbrio, equilíbrio parcial e valor instantâneo.

**b.1) Método 1 - Equilíbrio:** Utilizando esta abordagem, o cálculo da taxa de formação de NO térmico é consideravelmente simplificado. A concentração de oxigênio em  $\text{mol}/\text{m}^3$  pode ser obtida pela expressão 3.13 (ANSYS INC., 2011):

$$[O] = 3,97 \times 10^5 T^{-1/2} [O_2]^{1/2} e^{-31090/T} \quad (3.13)$$

**b.2) Método 2 - Equilíbrio parcial:** Esta método apresenta uma melhoria em relação ao Método 1 apresentado, através da inclusão de reações do tipo *third-body*, representado pelo parâmetro  $M$ , que estão presentes no processo de dissociação de  $O_2$ , como mostra as expressões 3.14 e 3.15.



$$[O] = 36,64 T^{1/2} [O_2]^{1/2} e^{-27123/T} \quad (3.15)$$

**b.3) Método 3 - Valor instantâneo:** Nesta abordagem o valor do radical O é obtido diretamente nos resultados envolvendo cinética detalhada. Assim, os valores empregados no cálculo do NOx via mecanismo térmico deverá resultar em valores mais precisos.

### 3.4.2 Mecanismo imediato/rápido (NO *prompt* ou de *Fenimore*)

Este mecanismo de formação ocorre pela reação de radicais hidrocarbônicos livres com a molécula de nitrogênio, sendo importante em regiões com misturas ricas.

### 3.4.3 Mecanismo via $N_2O$ (óxido nitroso)/rápido

Esta via de formação é relativamente pequena se comparada à quantidade formada pela via térmica em chamas convencionais, ou seja, NO térmico. Porém, este mecanismo desempenha um papel importante na produção de NO em zonas com misturas pobres e baixas temperaturas.

O cálculo da formação de NO via  $N_2O$  ocorre por meio de duas reações reversíveis, conforme apresentado nas expressões 3.16 e 3.17 (ANSYS INC., 2011). Nota-se na expressão 3.16 a presença do termo  $M$ , representando reações do tipo *third-body*.





O radical O, presente nas duas reações pode ser obtido através da dissociação de O<sub>2</sub>, conforme expressão 3.18:



Finalmente, a taxa de formação de NO via mecanismo intermediário é calculada pelo ANSYS Fluent® da seguinte forma:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{f,2}[N_2O][O] - k_{r,2}[NO]^2 \quad (3.19)$$

com  $k_{f,2} = 2,90 \times 10^7 e^{-11651/T}$  e  $k_{r,2} = 1,45 \times 10^{-29} T^{-9,259} e^{-11651/T}$  em  $m^3/mol \cdot s$ .

Assumindo  $[N_2O]$  como quase permanente resulta em:

$$[N_2O] = \frac{k_{f,1}[N_2][O][M] + k_{r,2}[NO]^2}{k_{r,1}[M] + k_{f,2}[O]} \quad (3.20)$$

com  $k_{f,1} = 4,44 \times 10^{32} T^{-8,358} e^{-28234/T}$  e  $k_{r,1} = 4,00 \times 10^8 e^{-28234/T}$

#### 3.4.4 Mecanismo via combustível

A formação de NO via combustível é função do teor de nitrogênio na composição do combustível queimado. Logo, em virtude da inexistência de nitrogênio na composição do combustível empregado neste trabalho, não haverá portanto, formação de NO via mecanismo do combustível.

Diante das expressões empregadas na determinação das concentrações de NO pelo ANSYS Fluent®, nota-se que podem ser feitas aproximações quando não se dispõe de dados relativos às concentrações, principalmente quando se empregam mecanismos globais de reação. Isto colabora para desvios e possíveis erros no processo de simulação

Finalmente, com relação as constantes presentes nas taxas de reações, tratam-se de valores obtidos experimentalmente, inicialmente calibrados para a formação do poluente em chamas convencionais. Assim, tais expressões pode não representar a formação de NO quando se opera no regime de combustão Sem Chama Visível, exigindo o uso de programas auxiliares concebidos apenas para o cálculo de NO.

## Capítulo 4

# DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Ao longo deste capítulo será apresentada a Dinâmica de Fluidos Computacional, bem como os principais métodos de discretização e as diferentes malhas utilizadas na solução numérica.

### 4.1 Introdução

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) corresponde a um conjunto de modelos e técnicas numéricas empregadas na modelagem envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e reações químicas de sistemas, utilizando meios computacionais (MALISKA, 1995).

O uso de tais técnicas numéricas tem ganhado destaque a cada ano, conforme pode ser identificado a partir da revisão bibliográfica realizada, graças ao desenvolvimento de computadores de alto desempenho e pelos avanços dos modelos numéricos, gerando bons resultados e reduzindo sensivelmente os custos de um projeto (MALISKA, 1995). Em geral, o pesquisador possui três elementos de análise: (a) métodos analíticos; (b) métodos numéricos e (c) experimentação em laboratório.

Os métodos analíticos apresentam muitas limitações frente à própria complexidade dos

problemas, resultando no uso de inúmeras hipóteses simplificadoras, que podem desviar demasiadamente dos resultados reais. No entanto, de acordo com Maliska (1995) os métodos analíticos têm um papel importante, sobretudo na validação e desenvolvimento dos métodos numéricos. Myers (1998) apresenta alguns métodos analíticos empregados em problemas de transferência de calor como Separação de Variáveis, Superposição, Transformada de Laplace e que podem auxiliar no desenvolvimento de métodos numéricos em diferenças finitas, elementos finitos dentre outros.

Em contrapartida, a experimentação em laboratório recorre à configuração real de problemas, porém com elevado custo, mas que permite a compreensão de novos fenômenos, sobretudo daqueles que ainda não possuem formulação matemática, além de apoio à interpretação dos resultados numéricos. No caso da experimentação numérica, por meio da utilização de métodos numéricos, é possível resolver problemas complexos em geometrias arbitrárias, de forma relativamente rápida e econômica, principalmente quando comparado com métodos experimentais.

Gonçalves (2007) reforça que a tarefa de um método numérico é resolver o conjunto de equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes na equação por expressões algébricas e técnicas numéricas que envolvem a função incógnita. Assim, um método analítico que tivesse a habilidade de resolver tais equações, permitiria obter a solução calculando os valores das variáveis dependentes num nível infinitesimal, isto é, para um número infinito de pontos. Por outro lado, o autor enfatiza que quando decidimos fazer uma aproximação numérica da equação diferencial, aceitamos ter a solução num número discreto de pontos (vértices da malha), esperando que, quanto maior for este número de pontos, mais próxima da solução exata será a nossa solução aproximada, isto é, numérica.

Neste sentido, a solução numérica envolve diversas etapas, passando pela escolha do modelo numérico que representa o processo físico, pela discretização do domínio e pela definição das condições de contorno do problema.

## **4.2 Métodos de Discretização**

De acordo com Gonçalves (2007), a base de qualquer método numérico é o modelo matemático, representado por exemplo, por um conjunto de equações diferenciais parciais e pelas condições de fronteira que regem o processo. Em seguida, o processo de simulação

continua com a escolha de um método de discretização, ou seja, um método para aproximar as equações diferenciais por um sistema de equações algébricas para as variáveis do problema, que serão obtidas em localizações discretas no espaço e no tempo. Tais pontos são representados pelos pontos nodais, conforme descrito a seguir.

Na Figura 4.1 pode ser observado a influência do número de elementos na representação da geometria do problema.

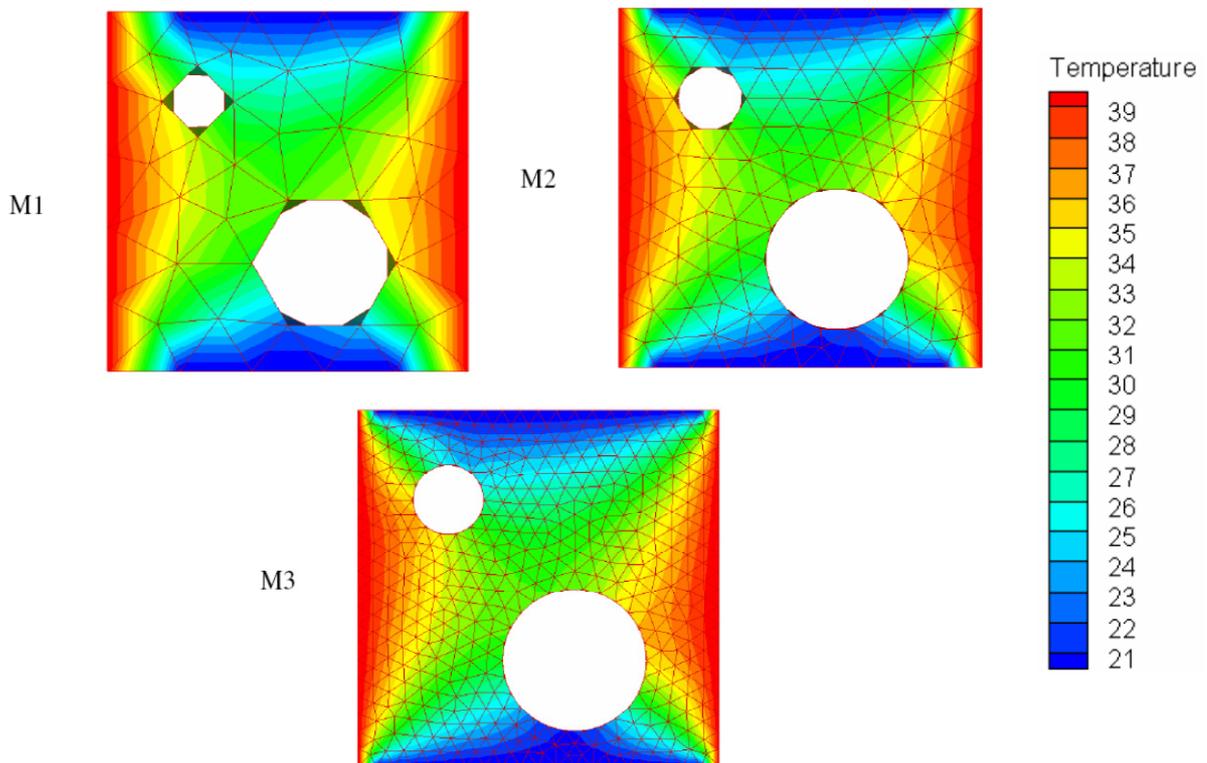


Figura 4.1 Distribuição de temperatura na placa:

M1 (134 nós), M2 (620 nós) e M3 (3335 nós) (GONÇALVES, 2007).

Diante dos diversos métodos de discretização disponíveis, Maliska (1995) reúne os principais:

- Método das Diferenças Finitas, MDF;
- Método dos Volumes Finitos, MVF;
- Método dos Elementos Finitos, MEF.

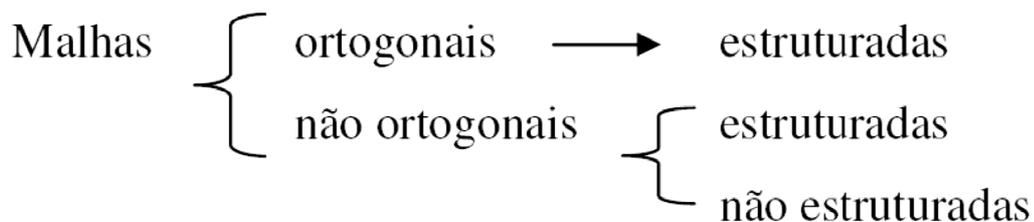
O MVF baseia-se na forma integral da equação da conservação, aplicando-a ao longo do domínio dividido em um número finito de volumes de controle, VC. De acordo com Gonçalves (2007), no centróide de cada VC localiza-se o chamado nó computacional, no qual são calculados os valores das variáveis, sendo os valores das variáveis nas superfícies dos VC

obtidos por interpolação em função dos valores nodais (localizados no centro do VC). As integrais de volume e de superfície são aproximadas usando fórmulas de quadratura apropriadas. Como resultado, obtém-se uma equação algébrica para cada VC, na qual aparecem os valores das variáveis no nó de interesse e naqueles adjacentes.

Segundo Gonçalves (2007), o MVF pode ser aplicado a qualquer tipo de malha, por isso adapta-se a geometrias complexas além de ser de compreensão mais simples, pois todos os termos que precisam ser aproximados têm significado físico, razão pela qual é popular entre os Engenheiros. Outra característica dos MVF é apresentar menos problemas de instabilidade ou convergência, pelo fato de garantir que em cada volume discretizado, a propriedade em questão, por exemplo massa, obedece à Lei da conservação. Diante das características apresentadas, o MVF será utilizado nas soluções numéricas deste trabalho.

### 4.3 Malhas Numéricas

Os locais onde as variáveis do processo serão calculadas são definidas pelas malhas numéricas, através do cruzamento de um conjunto de linhas e pontos que reproduzem a geometria do domínio. Deve-se observar, entretanto, que a escolha da malha influenciará na qualidade do resultado. A malha escolhida deve ser capaz de representar adequadamente as características gerais do problema, bem como se adequar aos contornos ou até mesmo ser refinada localmente para que as particularidades de cada fenômeno estudado possam ser representadas satisfatoriamente. Os tipos de malhas podem ser agrupados da seguinte maneira (GONÇALVES, 2007):



### 4.3.1 Malhas Ortogonais e Não Ortogonais

As malhas ortogonais são raramente empregadas, principalmente pela dificuldade de representar a fronteira do domínio, na maioria das vezes os problemas envolvem geometria complexa. Segundo Gonçalves (2007), outra desvantagem da utilização de sistemas de coordenadas ortogonais é o desperdício de recursos de armazenamento, pois a introdução de uma malha ortogonal fina numa região de interesse particular implica o desnecessário refinamento de outra região de interesse menor.

Marques (2005) revela que quando os centros dos volumes de controle adjacentes estão distribuídos de maneira que a “linha imaginária” que os une seja perpendicular à face comum, tem-se uma malha denominada ortogonal ou regular, conforme ilustrado na Figura 4.2.

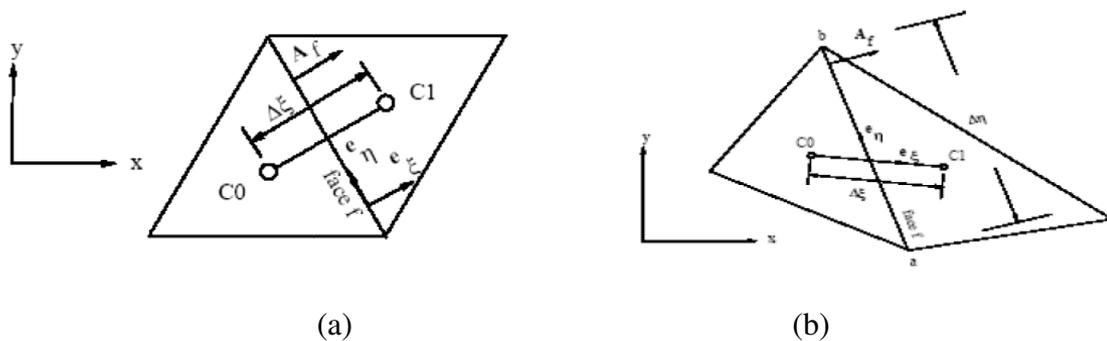


Figura 4.2 Representação de dois elementos de malha  
(a) ortogonal e (b) não ortogonal (MARQUES, 2005).

Na Figura 6.42a, os pontos C0 e C1 representam os centros dos volumes de controle adjacentes. Contudo, em situações práticas onde o domínio físico possui uma geometria dita complexa ou irregular, a ortogonalidade pode ser inviável. Neste caso, as malhas irregulares, também denominadas não ortogonais, possibilitam maior adaptabilidade aos contornos uma vez que não há restrição de ortogonalidade entre os elementos que as compõem, isto é, os centros dos volumes de controle adjacentes estão distribuídos de modo que a “linha imaginária” que une os seus centros não seja ortogonal à face comum, conforme mostrado na Figura 4.2b. A Figura 4.3 mostra um comparativo da adaptatividade de uma malha ortogonal em comparação com uma malha não ortogonal.

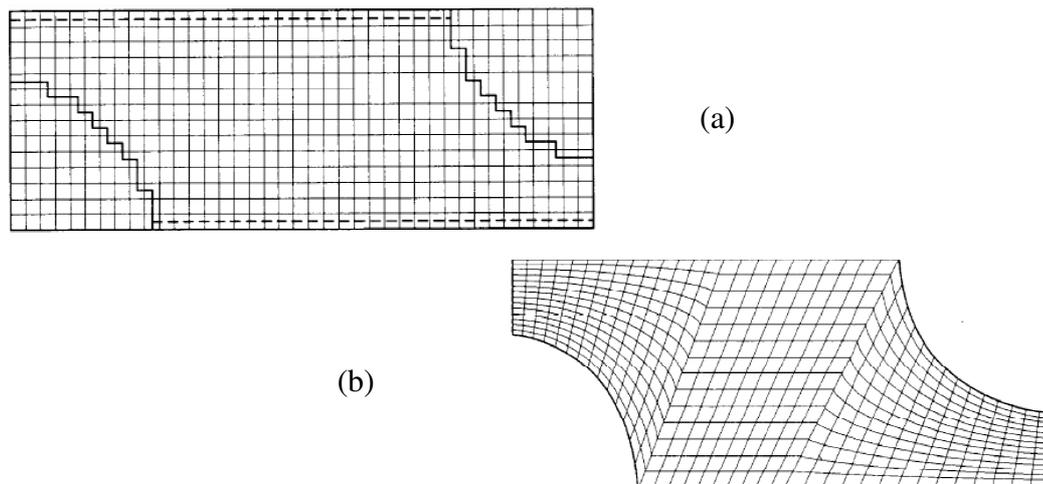


Figura 4.3 Adaptatividade dos elementos de malha (a) ortogonal e (b) não ortogonal (GONÇALVES, 2007)

### 4.3.2 Malhas Estruturadas e Não Estruturadas

A discretização do espaço pode ainda ser feita através de dois tipos principais de malhas, estruturadas e não estruturadas, relacionadas com a disposição relativa dos diferentes elementos. Esta disposição garante existência de uma Lei de formação entre os volumes e os nós do domínio resultando em características que tornam a construção da matriz dos coeficientes mais simples.

Embora exista a vantagem do ponto de vista da simplicidade na construção da matriz dos coeficientes, o emprego de malhas estruturadas pode não representar adequadamente regiões onde a complexidade da geometria é grande (MARQUES, 2005).

- Malhas Estruturadas

Segundo Maliska (1995), sob ponto de vista geométrico, uma malha é estruturada se cada volume interno possui o mesmo número de vizinhos. Gonçalves (2007) revela que nas malhas estruturadas seus elementos são dispostos em famílias de linhas, sendo que os membros de uma determinada família não se cruzam uns com os outros, atravessando cada membro das outras famílias apenas uma vez, possibilitando que sejam numeradas consecutivamente.

Contudo, em ambos os casos, as malhas estruturadas apresentam vantagens de permitir fácil ordenação, possibilitando a obtenção de matrizes diagonais mais simples de serem

resolvidas pelos algoritmos computacionais. Porém, a principal desvantagem está na limitação da aplicação em domínios com geometrias de complexidade média, além da dificuldade de distribuição dos pontos da malha.

Neste caso, uma concentração de células numa região da malha, por razões de precisão de cálculo implica necessariamente menor espaçamento em outras regiões do domínio e o consequente desperdício de recursos (GONÇALVES, 2007).

- Malhas Não Estruturadas

As malhas não estruturadas são bem adaptáveis a geometrias complexas e relativamente de fácil construção. Segundo Gonçalves (2007), teoricamente estas malhas podem ser usadas com qualquer método de discretização, mas adaptam-se melhor às aproximações por volumes finitos ou por elementos finitos. Seus elementos ou volumes de controle podem ter qualquer forma e não há restrição ao número de elementos vizinhos ou vértices. Na prática, malhas feitas de triângulos ou quadriláteros em 2D e tetraedros ou hexaedros em 3D são as mais frequentemente empregadas.

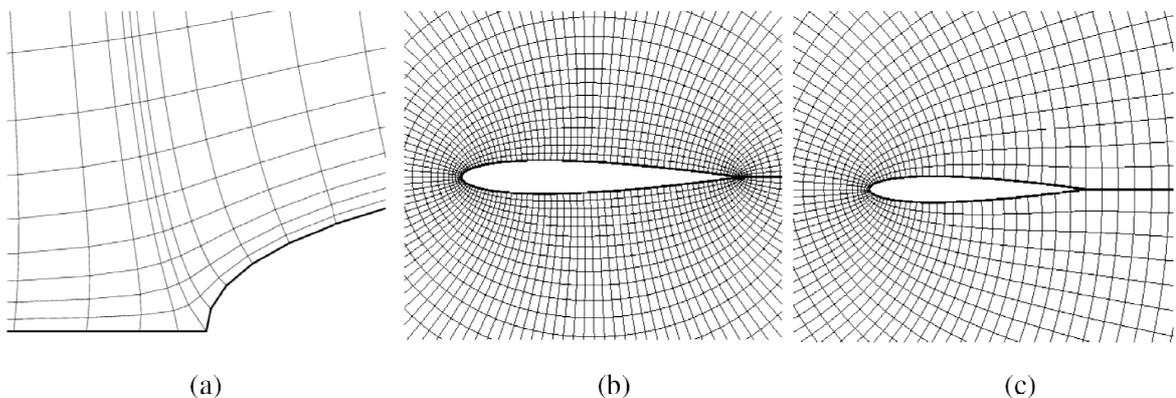


Figura 4.4 Malhas estruturadas (a) tipo H, (b) tipo O e (c) tipo C (GONÇALVES, 2007).

Gonçalves (2007) afirma ainda que a vantagem da flexibilidade das malhas não estruturadas é compensada pela desvantagem da irregularidade da estrutura dos dados e aumento de complexidade e formulação. Neste caso, a matriz do sistema de equações algébricas obtido já não possui estrutura diagonal regular, como na malha estruturada, necessitando de uma largura da banda reduzida para reordenação dos elementos.

Ao final, os algoritmos que resolvem os sistemas de equações algébricas são mais lentos que os algoritmos para malhas estruturadas, exigindo maior tempo e esforço computacional. Na Figura 4.5 está representada uma malha não estruturada, cujos contornos dos orifícios estão bem definidos, em razão da boa adaptabilidade deste tipo de malha.

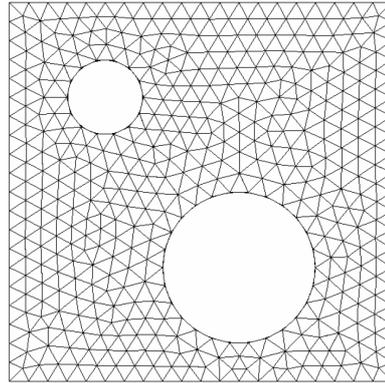


Figura 4.5 Exemplo de Malhas não estruturada (GONÇALVES, 2007).

### 4.3.3 Malhas Estruturadas Adaptadas

Considerando a principal desvantagem das malhas estruturadas, quanto a adaptação às geometrias complexas, diversas técnicas estão sendo desenvolvidas para contornar este problema. As mais conhecidas como a *Body-Fitted Meshes*, multiblocos de malha estruturadas e a *Cut-Cell* tentam compensar esta deficiência. As duas primeiras técnicas frequentemente exigem bastante esforço do usuário de CFD, mas há técnicas de geração automática e até códigos comerciais disponíveis. A terceira técnica, *Cut-Cell*, presente no ambiente ANSYS Meshing® é de extrema simplicidade e eficiência em quase todos os casos em que se lida com geometrias complexas. Ela consiste em um mapeamento preliminar de onde há partes sólidas ou fluidas no domínio e no consequente reposicionamento dos centros de volumes que são parcialmente sólidos.

## 4.4 Modelagem da Turbulência

A turbulência consiste em um fenômeno viscoso tridimensional instável que surge em elevados números de Reynolds, refletindo as rápidas e elevadas flutuações nos parâmetros característicos do escoamento como velocidade, pressão, temperatura e a concentração de espécies químicas. A turbulência é caracterizada como um fenômeno (SPODE, 2006):

- **tridimensional e rotacional:** em razão destas características, a turbulência ocorre em escoamentos onde se pode verificar algum processo de geração de vorticidade;

- **altamente difusivo:** por apresentar flutuações de velocidade nas três dimensões do espaço, potencializando o processo de difusão de calor, bem como o transporte de massa e quantidade de movimento;
- **altamente dissipativo:** pelos fortes gradientes de velocidade que provocam grandes taxas de cisalhamentos, contribuindo para o processo de dissipação viscosa e exigindo o fornecimento contínuo de energia para que o escoamento se mantenha turbulento. Caso contrário, as flutuações serão bastante atenuadas até atingir o estado estacionário;
- **contínuo:** apesar das menores estruturas turbilhonares apresentarem dimensões reduzidas, elas superam o livre caminho médio das partículas, podendo ser modelada sob a hipótese do contínuo;
- **impredicível:** devido a elevada não linearidade dos escoamentos turbulentos torna-se complexo reproduzi-la. Logo, as condições encontradas nunca serão perfeitamente idênticas, fornecendo diferentes caminhos para que as instabilidades se gerem e se propaguem ao longo do tempo. Contudo, mediante hipóteses simplificadoras, é possível prever a formação de estruturas turbilhonares e suas interações, retirando valiosas informações.

Spode (2006) comenta que os escoamentos turbulentos possuem um amplo espectro de energia, possuindo uma larga banda de frequências, que envolve tanto estruturas com baixa frequência, i.e., grandes comprimentos de onda e alta frequência, i.e., pequeno comprimento de onda.

De acordo com Baukal (2013) as flutuações presentes na turbulência ocorrem em virtude de mecanismos próprios criados pelo escoamento, representando cerca de 2 % a 10 % do valor médio, por exemplo, em termos dos componentes da velocidade. Apesar de não representar uma grande porcentagem, estas flutuações influenciam enormemente no padrão médio de escoamento. O autor também afirma que o impacto é ainda maior em grandezas do escoamento que são função de outras propriedades do escoamento, como temperatura e concentrações químicas. Logo, uma representação mais precisa destas flutuações deve sempre ser pretendida em análises de escoamento.

A modelagem do fenômeno da turbulência pode ser dividida segundo três principais abordagens, descritas com maiores detalhes a seguir (BAUKAL, 2013):

- *Direct Numerical Simulation*, DNS.
- *Large Eddy Simulation*, LES.
- *Reynolds-averaged Navier Stokes*, RANS.

Na Figura 4.6 estão representados os principais métodos empregados na modelagem da turbulência, enfatizando a aproximação de cada abordagem ao resultado experimental. Nota-se que a abordagem RANS corresponde a uma média do valor da grandeza no tempo, contrariamente a abordagem LES que acompanha as flutuações características do experimento, tornando o resultado numérico mais representativo.

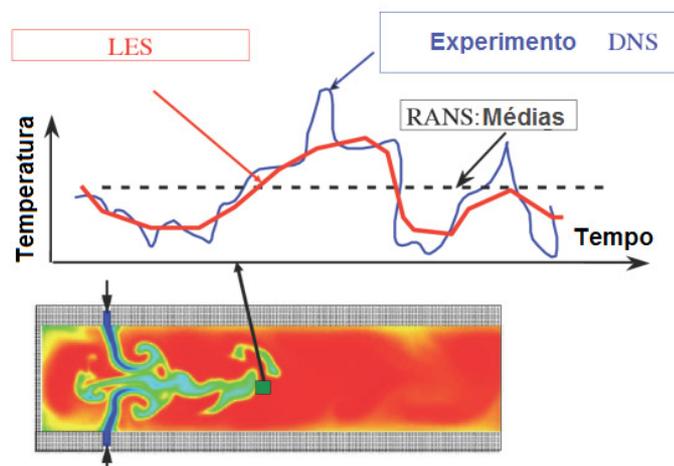


Figura 4.6 Comparativo entre as principais abordagens na modelagem da turbulência (POINSOT *et al.*, 2013).

## 4.5 Abordagem DNS

O método DNS resulta na solução numérica das equações de Navier Stokes, sem o uso de termos para solução ou fechamento para mesmas. Logo, todo o comprimento característico e as escalas de tempo são resolvidas. Segundo Baukal (2013) a principal vantagem deste método é a sua inerente exatidão no resultado esperado, por exemplo através de valores instantâneos para pressão e temperatura. Isto exige um grande esforço computacional, principalmente em escoamentos turbulentos e reativos, o que limita sua aplicação em geometrias mais complexas.

O uso da metodologia DNS implica na utilização de uma malha capaz de descrever todo o espectro de frequências, incluindo as escalas de Kolmogorov (SPODE, 2006). As chamadas

escalas de Kolmogorov correspondem às escalas de dimensão, tempo e velocidade dos menores vórtices ou flutuações de velocidade encontrados em escoamento turbulento (COELHO & PETERS, 2001; VEYNANTE & VERVISCH, 2002). Logo, a solução DNS, além do elevado refino exigido, são necessários esquemas de discretização espacial e temporal de alta ordem, afim de minimizar a difusão numérica no cálculo final.

Um exemplo da discussão apresentada está ilustrado na Figura 4.7, obtida de Bakker (2002), observando que a abordagem DNS resolve todos os tipos de escalas, o que demanda certamente maior tempo na solução.

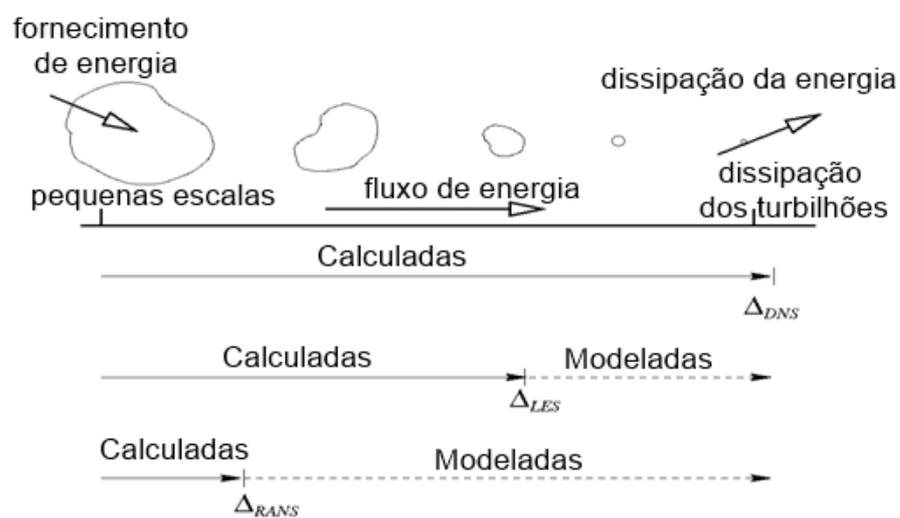


Figura 4.7 Solução para diferentes abordagens de turbulência (BAKKER, 2002)

## 4.6 Abordagem LES

Na simulação LES, o resultado final é obtido através de cálculos utilizando os termos de grande escala presentes na turbulência, considerando iguais os termos de pequena escala. Este procedimento exige malhas menos refinadas, em comparação com o método DNS. Para modelagem do processo de combustão, Baukal (2013) revela que este método é promissor, sobretudo pela capacidade de prever possíveis instabilidades nos equipamentos industriais e interações do tipo turbulência-química.

A Figura 4.8 apresenta o resultado numérico da distribuição da velocidade na dependência do tempo, indicando as instabilidades no campo de escoamento.

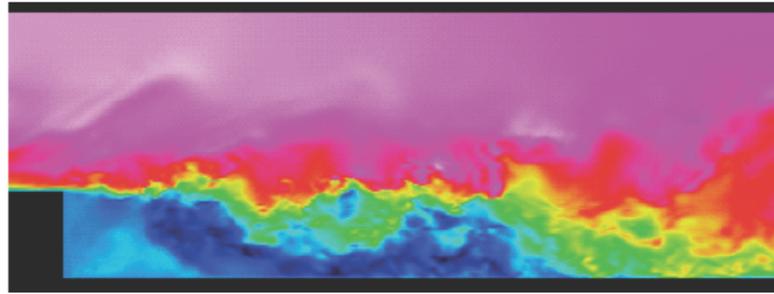


Figura 4.8 Exemplo de cálculo em CFD utilizando a abordagem LES  
(POINSOT *et al.*, 2013)

## 4.7 Abordagem RANS

Esta abordagem conhecida como RANS é o mais estudado e empregado dentre os métodos apresentados, principalmente pela sua enorme facilidade de aplicação em casos típicos industriais. Ele se baseia na conservação, em termos médios no tempo, da massa, do momento e da energia. Contudo, isto reflete na principal desvantagem do método, que é a perda de informação das possíveis flutuações que venham a ocorrer no escoamento turbulento. Contudo, tanto no meio acadêmico quanto industrial, análises em CFD baseando-se no método RANS fornecem aproximação suficiente para a modelagem da turbulência (BAUKAL, 2013). Porém, o autor enfatiza que os modelos numéricos que empregam o método RANS devem se esforçar para contabilizar adequadamente os efeitos destas flutuações no escoamento principal, reduzindo a perda de informações inerente.

Pela Figura 4.9, observa-se um resultado obtido pela abordagem RANS, com características médias, em contraste com o mesmo resultado mostrado anteriormente na Figura 4.8 sob a abordagem LES.

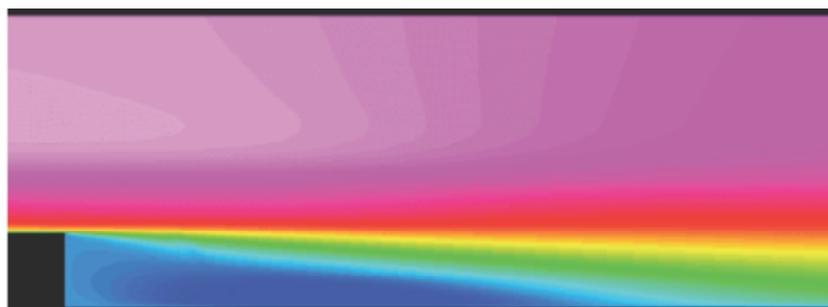


Figura 4.9 Exemplo de cálculo em CFD utilizando a abordagem RANS  
(POINSOT *et al.*, 2013)

Em virtude dos modelos numéricos empregados neste trabalho, nas próximas seções, as características do método RANS serão discutidas com maiores detalhes.

Para escoamentos de natureza turbulenta, uma grandeza escalar instantânea pode ser decomposta em dois termos, sendo um termo principal e outro destinado aos efeitos da flutuação, conforme Baukal (2013) demonstra para a velocidade. Esta expressão 4.1 é também conhecida como decomposição de Reynolds.

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (4.1)$$

sendo que  $u_i$  representa uma variável escalar instantânea qualquer, no exemplo, velocidade;  $\bar{u}_i$  o valor médio da velocidade e  $u'_i$  o termo de flutuação da velocidade.

Aplicando a Equação 4.1 nas expressões da conservação da massa e da quantidade de movimento instantâneas, resulta em:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i) = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_l} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad (4.3)$$

sendo que  $\rho$  representa a massa específica e  $\delta_{ij}$  o delta de *Kronecker*.

Estas expressões são encontradas na literatura como as equações RANS. Analisando-as, observa-se que tem a mesma forma geral das equações instantâneas de Navier Stokes, apenas diferenciando no termo médio incorporado. De acordo com Baukal (2013), o último termo da Equação 4.3, conhecido como Tensões de Reynolds, representa os efeitos da turbulência, sendo resolvido de modo diferente segundo cada modelo numérico presente nos programas computacionais. Neste caso, cada modelo numérico possui uma estratégia para determiná-lo e, desta forma, "fechar" a solução das equações de quantidade de movimento.

Baukal (2013) alerta que na modelagem da turbulência em processos de combustão, a decomposição de Reynolds da Equação 4.1 resultará em mais termos de flutuação, por exemplo no caso da flutuação da massa específica em escoamentos compressíveis. Assim, este maior número de termos flutuantes irá dificultar a solução das equações de RANS. Contudo, um procedimento baseado na média ponderada da massa específica (*density-weighted*), e conhecido como *favre*, é normalmente empregado para se reduzir o número de termos a ser modelado.

## 4.8 Modelagem Numérica da Turbulência

Quando se refere na modelagem da turbulência, busca-se a solução destas tensões de Reynolds para se determinar o campo de velocidades do escoamento, seja através do tipo *Reynolds-averaged* ou *Favre-averaged*.

Dentre os inúmeros caminhos para se determinar as tensões de Reynolds, Baukal (2013) afirma que o mais simples emprega a hipótese de *Boussinesq*, onde as tensões de Reynolds são consideradas como função das tensões viscosas e representadas em termos de viscosidade turbulenta, *Eddy Viscosity*, e da tensão de cisalhamento:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (4.4)$$

sendo que  $\mu_t$  corresponde a viscosidade turbulenta e p termo  $k$  a energia cinética turbulenta.

Embora a partir da Equação 4.4 as tensões de Reynolds foram reescritas em termos do campo médio de velocidades, a viscosidade turbulenta ainda deve ser determinada. A principal vantagem está no baixo custo computacional associado ao cálculo da viscosidade turbulenta (ANSYS INC., 2011).

Existem diversos métodos para determinação da viscosidade turbulenta, necessária à solução da Equação 4.4, sendo classificados em função da quantidade de equações adicionais empregadas, em geral através de modelos algébricos com apenas uma equação ou duas equações.

### 4.8.1 Modelos algébricos ou Zero Equação

Os modelos algébricos, como o próprio nome sugere, empregam relações algébricas ao invés de equações diferenciais, durante a determinação local da viscosidade turbulenta, sendo expressas pela Equação 4.5 (BAUKAL, 2013).

$$\mu_t = \rho l_{mix}^2 \left| \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial y} \right| \quad (4.5)$$

sendo  $y$  a coordenada normal à parede e  $l_{mix}$  é o comprimento de mistura.

Tais modelos tem boa aplicação em problemas unidimensionais e escoamento simples próximo à parede. Porém, em virtude da determinação do comprimento de mistura, tais

modelos não apresentam adequadamente escoamentos tridimensionais, bem como efeitos de turbulência (BAUKAL, 2013).

#### 4.8.2 Modelos de uma equação

Nos modelos que empregam uma equação adicional, a viscosidade resultante depende da velocidade e comprimento característico. A velocidade característica é proporcional a raiz quadrada da energia cinética turbulenta,  $k$ , definida como  $k = \overline{u'_i u'_j} / 2$ , enquanto o comprimento característico é considerado como o comprimento de mistura de Prandtl. De acordo com Baukal (2013), pelo fato de  $k$  variar ao longo do escoamento, os termos da turbulência são considerados, contrariamente aos modelos algébricos. Porém, ainda é necessário nos modelos de uma equação, a determinação do comprimento característico, o que dificulta a aplicação dos mesmos em problemas de escoamento genérico, ou seja, quando se torna difícil definir este comprimento.

O modelo numérico mais popular de uma equação é o *Spalart-Allmaras*, mostrado na Equação 4.6, sendo inicialmente desenvolvido para aplicações aeroespaciais, para estudo do escoamento ao redor de aerofólios. Os resultados apresentados pelo modelo foram bons principalmente na análise dos efeitos da camada limite quando submetidos à gradientes de pressão adversos. Aos poucos, tem obtido popularidade para aplicações de turbomáquinas (ANSYS INC., 2011).

$$\mu_t = \rho \tilde{\nu} \left[ \frac{(\tilde{\nu}/\nu)^3}{(\tilde{\nu}/\nu)^3 + c_{\tilde{\nu}1}^3} \right] \quad (4.6)$$

sendo  $\tilde{\nu}$  determinado a partir da equação de transporte da viscosidade modificada, mostrada na Equação 4.7.

$$\rho \frac{D\tilde{\nu}}{Dt} = \rho c_{b1} \tilde{S} \tilde{\nu} + \frac{1}{\sigma_{\tilde{\nu}}} \left[ \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ (\mu + \rho \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right\} + \rho c_{b2} \left( \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right)^2 \right] - \rho c_{w1} f_w \frac{\tilde{\nu}}{d^2} \quad (4.7)$$

sendo  $\rho c_{b1} \tilde{S} \tilde{\nu}$  corresponde ao termo geração;  $\frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ (\mu + \rho \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right\} + \rho c_{b2} \left( \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right)^2$  corresponde ao termo difusão e  $\rho c_{w1} f_w \frac{\tilde{\nu}}{d^2}$  corresponde ao termo destruição.

As demais constantes empregadas pelo método estão descritas com detalhes em ANSYS Inc. (2011).

### 4.8.3 Modelos de duas equações

Os modelos que utilizam duas equações de transporte adicionais são mais eficazes na determinação do comprimento característico, essencial para o cálculo da viscosidade turbulenta, conforme mencionado anteriormente. Além disso, são adequados para aplicação em escoamentos genéricos tridimensionais, comuns na aplicação industrial. Os principais modelos que integram esta classe são o  $k$ - $\varepsilon$  e  $k$ - $\omega$ , que resolvem respectivamente a energia cinética turbulenta,  $k$ , a taxa de dissipação turbulenta,  $\varepsilon$ , além da taxa de dissipação específica,  $\omega$  (BAUKAL, 2013).

De acordo com Baukal (2013), pode ser provado, sob determinadas condições, a relação  $\varepsilon \sim (k^{3/2})/l$ . Considerando que a grandeza  $l$  esta relacionada com o comprimento de mistura, e que  $\varepsilon$  é determinado a partir de uma equação de transporte, a viscosidade turbulenta pode ser expressa em termos de  $k$  e  $\varepsilon$ . Usando a mesma estratégia, a variável  $\omega$  pode ser relacionada com o comprimento de mistura. A seguir, os modelos de turbulência  $k$ - $\varepsilon$ , juntamente com suas variações, estão descritos.

#### a) Modelo $k$ - $\varepsilon$ *Standard*

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  *Standard* resolve as equações de conservação para as grandezas citadas anteriormente, cujas respectivas equações de transporte podem ser obtidas através das equações de Navier-Stokes. Tais equações de transporte para a energia cinética turbulenta e taxa de dissipação turbulentas possuem a seguinte forma (BAUKAL, 2013):

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\varepsilon\bar{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\mu} \frac{\varepsilon}{k} (G_k) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k\bar{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + \rho\varepsilon \quad (4.9)$$

sendo que  $C_{1\mu}$  e  $C_{2\varepsilon}$  correspondem à constantes. No caso dos parâmetros  $\sigma_\varepsilon$  e  $\sigma_k$  representam o número de Prandtl turbulento, respectivamente, para  $\varepsilon$  e  $k$ .

As constantes empregadas pelo modelo tem valores,  $C_{1\mu}=1,44$ ,  $C_{2\varepsilon}=1,92$ ,  $C_\mu=0,09$ ,  $\sigma_k=1,0$  e  $\sigma_\varepsilon=1,3$ . A viscosidade turbulenta pode ser calculada através da Equação 4.10.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.10)$$

Finalmente, Baukal (2013) afirma que o modelo k- $\varepsilon$  *Standard* deve ser aplicado preferencialmente em escoamentos completamente turbulentos e onde os efeitos da viscosidade podem ser desprezados.

## b) Modelo RNG k- $\varepsilon$

Diante dos inúmeros termos resultantes das equações de Navier Stokes pelo modelo k- $\varepsilon$ , diversas constantes foram empregadas. Segundo Baukal (2013) os valores de tais constantes foram baseados em poucos dados experimentais, o que permite interpretações diversas para cada pesquisador. Neste sentido, o modelo RNG k- $\varepsilon$  caracteriza pelo emprego de técnicas matemáticas, dados físicos e aproximações de outros modelos numéricos, no sentido de substituir tais constantes empíricas e reduzir tais deficiências. As novas constantes propostas fazem parte da chamada teoria RNG.

As equações de transporte do modelo RNG apresentam termos semelhantes ao k- $\varepsilon$  padrão, conforme observado nas próximas equações.

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\varepsilon\bar{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\mu} \frac{\varepsilon}{k} (G_k) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k\bar{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + \rho \varepsilon \quad (4.12)$$

sendo que  $\alpha_\varepsilon$  e  $\alpha_k$  correspondem ao inverso do número de Prandtl para o parâmetro  $\varepsilon$  e k, respectivamente.

## c) Modelo k- $\varepsilon$ *Realizable*

Este modelo tem desenvolvimento recente e contém uma nova equação de transporte para a taxa de dissipação,  $\varepsilon$ , bem como para a constante crítica,  $c_\mu$ , que antes era assumida como constante, passa a ser expressa em função das características do escoamento e propriedades da turbulência. Isto torna, segundo Baukal (2013), o modelo mais consistente com os aspectos físicos da turbulência, tornando-se mais coerente e factível de ocorrer, do

inglês *realizability*. Além disso, possui boa previsão em escoamentos com forte recirculação e na presença dos chamados *round jets*, sob forte gradiente adverso de pressão, separação e recirculação, tornando-se uma boa escolha na modelagem da combustão Sem Chama Visível.

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\varepsilon\bar{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_{1\mu} S_\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k \bar{u}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + \rho \varepsilon_k \quad (4.14)$$

Os valores das constantes matemáticas do modelo *k-ε Realizable* são:  $C_{1\mu}=1,44$ ,  $C_2=1,9$ ,  $\sigma_k=1,0$  e  $\sigma_\varepsilon=1,2$ . Maiores detalhes acerca dos significados dos termos das Equações 4.13 e 4.14 estão disponíveis em ANSYS Inc. (2011) e Baukal (2013).

## 4.9 Modelagem da Combustão

A modelagem da combustão representa uma importante etapa do processo de simulação numérica de problemas reativos, assim como a turbulência. A combustão pode ser classificada como pré-misturada, parcialmente pré-misturada e difusa, conforme o combustível e o oxidante são injetados na região de queima.

Segundo Baukal (2013), numa combustão pré-misturada, o combustível e na maioria dos casos, o ar atmosférico, são corretamente misturados em um nível molecular, antes de serem introduzidos na região de queima. Quando a mistura não ocorre perfeitamente, a razão de equivalência não permanece uniforme, caracterizando um chama parcialmente pré-misturada. Por último, nas chamas difusas ou não pré-misturadas, o combustível e o ar não são misturados até atingirem a zona de reação. Neste caso, a taxa de reação é limitada pela difusão dos reagentes ao longo da frente de chama (BAUKAL, 2013).

Uma das principais vantagens das chamas difusas encontra-se na impossibilidade da frente de chama propagar na direção da região de mistura rica, de acordo com Baukal (2013) em virtude da falta de oxidante, o que evita o fenômeno de retorno da chama e propagação, bem como autoignição em regiões indesejáveis, trazendo segurança nas aplicações. Dentre outros motivo, o emprego deste tipo de chama na indústria é altamente atrativo.

O processo de combustão envolve centenas de reações químicas que podem inviabilizar quaisquer cálculos em virtude da complexidade associada. Logo, hipóteses como

irreversibilidade do sentido de reação, queima em única etapa, reação infinitamente rápida são algumas ferramentas empregadas na análise de problemas de combustão. Contudo, para estudos mais aprofundados, a reação global não é suficiente. De acordo com Baukal (2013), apesar das simplificações considerarem a energia total liberada numa combustão completa, a previsão da formação de poluentes, principalmente CO, NO<sub>x</sub> e SO<sub>x</sub>, a combustão incompleta e a estabilidade da queima ficarão prejudicados.

Em razão da forte ligação entre a turbulência e a cinética química das reações, o número de Damköhler,  $Da$ , que consiste em uma grandeza adimensional que traduz uma relação entre o tempo característico da reação química e da mistura turbulenta, corresponde a um importante parâmetro em chamas turbulentas difusas.

$$Da = \frac{\tau_{mist}}{\tau_{qui}} \quad (4.15)$$

sendo  $\tau_t$  relativo ao tempo característico da mistura turbulenta e  $\tau_c$  o tempo característico da reação química;

Com base no número de Damköhler, para  $Da \gg 1$ , tem-se um combustão rápida, onde o tempo químico é pequeno em comparação com o turbulento, o que corresponde a uma zona de reação fina deformada e "convectada" pelo campo de escoamento. Neste caso, quem governa a taxa de reação química é a turbulência. Para  $Da \ll 1$ , tem-se uma reação química lenta, sendo a combustão limitada pela cinética química (SALVADOR, 2012)

Os modelos numéricos de combustão disponíveis no ANSYS estão mostrados na Figura 4.10, ordenados inicialmente pelo número de Damköhler. Considerando o regime de combustão Sem Chama Visível, em virtude da presença de forte turbulência desenvolvida pela injeção dos reagentes a alta velocidade, aliada a uma taxa de reação lenta e distribuída ao longo de todo o volume, fazem com que este regime seja controlado tanto pela turbulência quanto pelas reações químicas. Logo, isto resulta em um número de Damköhler próximo da unidade, dificultando a escolha do modelo numérico mais adaptado, conforme pode se observar pela Figura 4.10. Galletti *et al.* (2007) afirmam que este valor de Damköhler é consenso entre os pesquisadores para o regime de combustão Sem Chama Visível

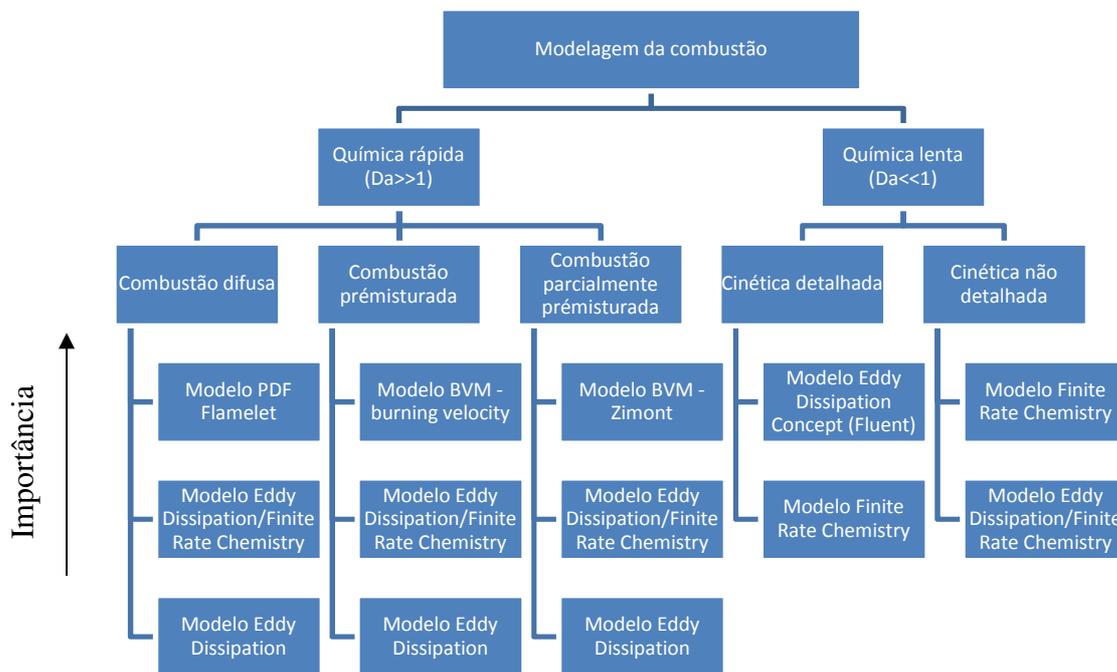


Figura 4.10 Modelos numéricos de combustão presentes no ANSYS  
(FONTES; BACCHI, 2010)

#### 4.9.1 Eddy Dissipation Concept, EDC

Diante da dificuldade em estabelecer o modelo de combustão ideal, sob o ponto de vista do número de Damköhler, o modelo de combustão EDC tem sido largamente utilizado em análises da combustão Sem Chama Visível. Este modelo foi apresentado originalmente por Magnussen & Hjertager (1976), possuindo os princípios básicos do modelo ED além da possibilidade de inclusão de mecanismos detalhados de reação, que trazem melhores resultados na caracterização do processo de queima e na previsão da formação de poluentes.

Segundo Baukal (2013) o modelo EDC tem sido aplicado tanto em chamas difusas ou pré-misturadas quanto em reações de combustão rápida ou lenta. Basicamente, ele considera que as reações ocorrem em pequenos turbilhões, do inglês *eddies*, na escala de Kolmogorov. Logo, cada vórtice é considerado uma fina estrutura agindo como um reator bem misturado. Sem dúvida, esta consideração está intimamente ligada ao processo de queima Sem Chama Visível, pois diversos pesquisadores tem reproduzindo simplificada o regime por meio de um conjunto de reatores bem misturados.

As finas estruturas mencionadas anteriormente são, neste modelo de combustão, responsáveis pela mistura a nível molecular, utilizando informações dos parâmetros de

turbulência  $k$  e  $\varepsilon$ , da formulação RANS. Neste caso, o modelo de combustão é controlado também pelo processo de mistura e fortemente dependente do modelo de turbulência. Uma das expressões empregadas pelo modelo EDC, no caso, para taxa de reação é dada por: (MAGNUSSEN & HJERTAGER, 1976; BAUKAL, 2013).

$$\dot{Y}_F = 23,6 \left( \frac{\nu\varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \left( \frac{\varepsilon}{k} \right) \mathcal{X} \bar{Y}_{\min} \quad (4.16)$$

sendo  $\dot{Y}_F$  correspondente à taxa de consumo do combustível;  $\nu$  a viscosidade cinemática,  $\mathcal{X}$  como fator de correção, uma vez que somente as frações suficientemente aquecidas nas pequenas estruturas devem reagir e  $\bar{Y}_{\min}$  limita a taxa de reação.

Diante do nível de detalhe do modelo, calculando as reações em finas estruturas, o tempo computacional é maior. Para tanto, o uso de mecanismos que aceleram a convergência através das tabelas ou técnicas ISAT (*In-Situ Adaptive Tabulation*) devem ser utilizados. A técnica ISAT idealizada por Pope (1997), consiste num procedimento de armazenamento e recuperação, via tabela, dos resultados obtidos ao longo das iterações realizadas. Neste caso, a medida que a tabela é realimentada, os resultados parciais tendem a se aproximar do valor desejado. Ao final, torna-se possível uma redução do tempo computacional gasto nas simulações numéricas, sobretudo na presença de cinética química detalhada tornando-se fundamental.

## 4.10 Modelagem da Radiação

A modelagem da radiação assume papel importante na análise de problemas de combustão, afetando a previsão dos valores de temperatura e estrutura da chama, a transferência de calor através das paredes, os produtos da combustão formados e a emissão de gases poluentes.

Dentre os modelos de radiação disponíveis no ANSYS Fluent®, especialmente para o regime de combustão Sem Chama Visível, tem-se empregado largamente o modelo DO mostrado com maiores detalhes a seguir.

### 4.10.1 Discretos Ordinates, DO

O modelo de radiação através das ordenadas discretas resolve as equações de transferência por radiação para um número finito de ângulos sólidos discretos, que estão associados a um vetor de direção  $\bar{s}$  arbitrária, fixada no sistema cartesiano global  $(x, y, z)$ . O nível de discretização angular é controlado pelo usuário. Neste caso, o método irá resolver a equação de transferência por radiação na direção determinada tantas vezes o domínio for discretizado.

O nível de detalhamento obtido pelo método DO deve fornecer bons resultados no regime de combustão Sem Chama Visível, considerando que a transferência por radiação está distribuída ao longo de todo o domínio e não somente restrita à região de chama.

Outro ponto importante, corresponde as propriedades da radiação, principalmente quanto ao coeficiente de absorção, que indica o quanto da radiação emitida foi absorvida pelos produtos da combustão. Neste caso, o uso da ferramenta WSGG (*Weighted Sum of Gray Gases*) calcula um coeficiente de absorção variável ao longo do domínio, em função da composição dos gases (AZEVEDO, 1999). Os coeficientes da ferramenta podem ser ajustados, por exemplo, adaptando-os para o regime Sem Chama Visível, conforme tabela para oxcombustão em Baukal (2013), página 365.

Para Azevedo (1999), a estimativa do coeficiente de absorção dos gases, no interior da fornalha, utilizando WSGG, produziu diferenças significativas em relação aos resultados com coeficiente de absorção constante. Na prática, esta consideração provoca uma diminuição da temperatura dos gases, bem como um aumento generalizado na temperatura média das paredes, conforme pode ser observado na Figura 4.11. Esta uniformidade de temperaturas mais baixas é uma característica presente na combustão Sem Chama Visível.

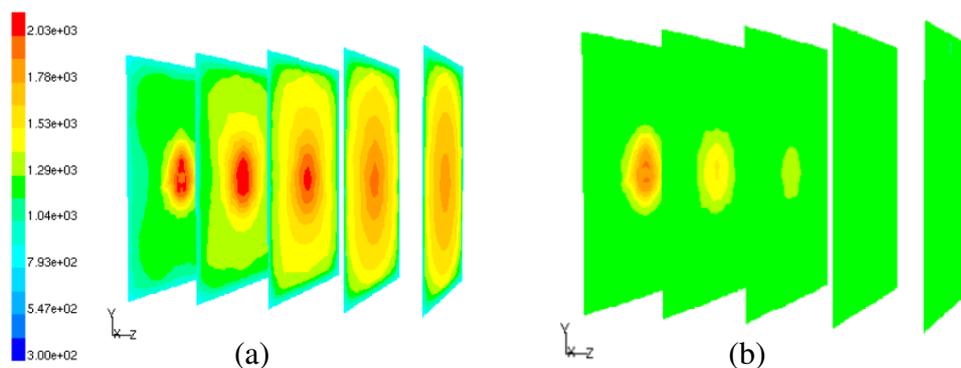


Figura 4.11 Perfis de temperatura dos gases de combustão com coeficiente de absorção: (a) constante e (b) ferramenta WSSGM (AZEVEDO, 1999).

Finalmente apesar dos pesquisadores utilizarem este modelo para modelagem da combustão Sem Chama Visível, conforme identificado no item 2.3 da tese, outros modelos como *PI* e o *Discrete Transfer* devem ser testados, afim de a comprovar possíveis deficiências.

## 4.11 Mecanismos de Reação

Alguns dos mecanismos de reação estão listados na Tabela 4.1, juntamente com o número de espécies e de reações incluídas. O mecanismo metano/ar corresponde a reação global para queima do metano, considerando  $H_2O$  e  $CO_2$  nos produtos, sem resultar na formação de  $CO$ . Trata-se de uma aproximação inicial, com baixo tempo computacional e grande simplificação. Porém, quando se requer uma investigação mais detalhada da formação de poluentes e detalhamento do processo de combustão, mecanismos mais robustos devem ser empregados.

Em virtude do excessivo tempo computacional exigido pelo detalhamento da combustão, mecanismos conhecidos como reduzidos são empregados, tais como SK17, Smooke e KEE-58, contendo um número menor de espécies químicas e reações intermediárias. Já os mecanismos detalhados como GRIMech1.2, GRIMech2.11 e GRIMech3.0 são mais precisos e operam com maior número de espécies químicas (GRAÇA, 2012; SMITH *et al.*, 2014).

Tabela 4.1 Mecanismos de reação numéricos (GRAÇA, 2012)

Nome	Espécies Químicas	Reações Intermediárias
Metano/ar 1 etapa	4	1
SK17	13	73
Smooke	16	46
KEE58	18	58
DRM19	19	84
GRIMech1.2	32	177
GRIMech2.11	49	277
GRIMech3.0	53	325

## Capítulo 5

# EXPERIMENTO: CARACTERÍSTICAS DO QUEIMADOR SEM CHAMA VISÍVEL

Ao longo deste capítulo serão apresentadas as características de funcionamento e principais dimensões do queimador projetado para o regime de Combustão Sem Chama Visível, cujos resultados experimentais obtidos por Veríssimo (2011) foram comparados à simulação numérica realizada.

### 5.1 Aspectos básicos do queimador

O queimador utilizado neste trabalho foi objeto de estudo da tese de doutorado de Veríssimo (2011). Trata-se de um queimador de geometria cilíndrica com escoamento central do ar de combustão e 16 injetores de combustível, dispostos radialmente a uma distância de 15 mm do centro do queimador. Um desenho do queimador, contendo as principais dimensões é apresentado na Figura 5.1b, juntamente com uma representação da bancada de teste na Figura 5.1a.

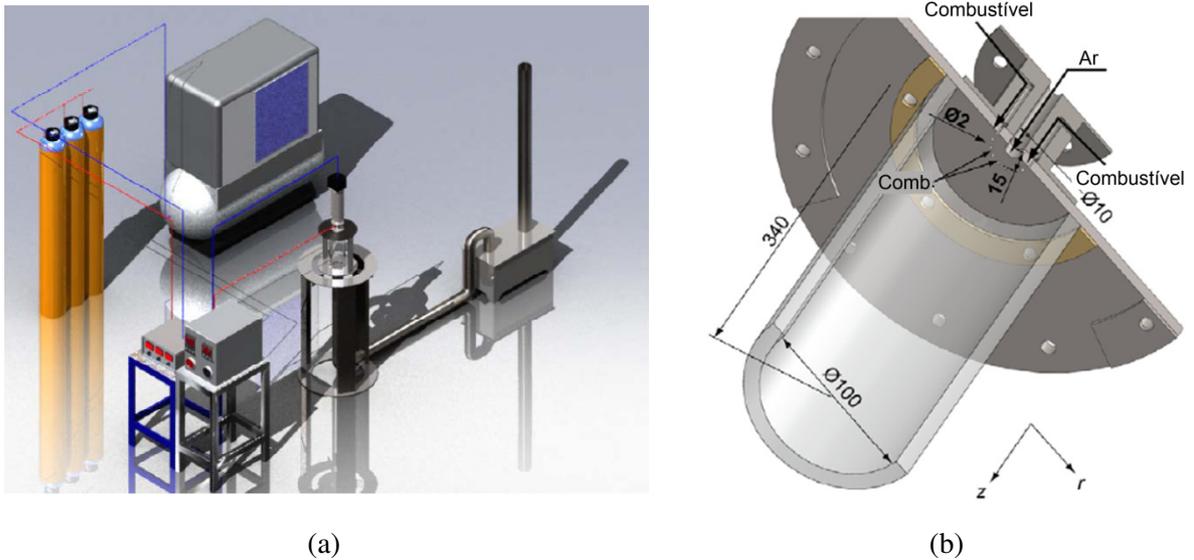


Figura 5.1 Representação esquemática

(a) bancada experimental e (b) perspectiva tridimensional queimador (VERÍSSIMO, 2011).

O queimador mostrado na Figura 5.1 foi construído com quartzo afim de permitir acesso óptico ao interior da câmara de combustão, em particular à zona de reação. A injeção de ar de combustão é feita por um orifício central de 10 mm de diâmetro interno e comprimento de 80 mm, sendo a injeção de combustível realizada por 16 orifícios com 2 mm de diâmetro cada, posicionados ao redor do jato central. Outro detalhe a respeito da disposição dos injetores e do material isolante empregado para minimizar as perdas de calor para o ambiente, podem ser observados pela Figura 5.2.

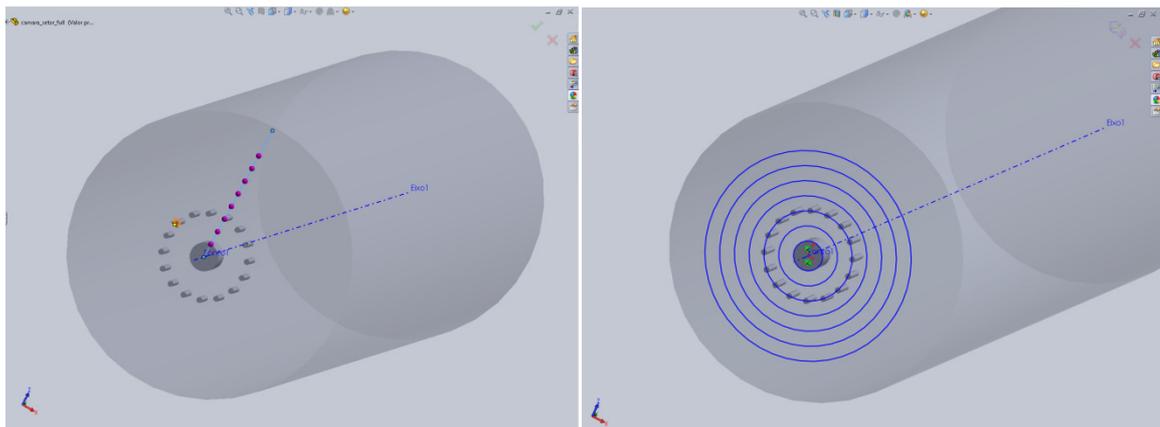


Figura 5.2 Detalhe do posicionamento dos injetores e do revestimento do queimador (VERÍSSIMO, 2011).

## 5.2 Procedimento de Medida

As medidas experimentais de combustão da Tabela 5.1 foram obtidas em planos radiais situados a 11 mm, 45 mm, 79 mm, 113 mm, 147 mm, 181 mm, 215 mm, 250 mm, 280 mm e 310 mm partindo do injetor. No plano radial, foram feitas medidas desde o eixo central até 45 mm no raio, espaçadas a cada 5 mm, conforme ilustrado na Figura 5.3a. Com relação às espécies químicas no interior e nos gases de exaustão da câmara de combustão, elas foram obtidas por Veríssimo (2011) com o auxílio de uma sonda de sucção de gases arrefecida a água (sonda de arrefecimento convectivo indireto). Para identificar a zona de reação foi utilizado imagens do radical  $\text{OH}^*$ . As medidas experimentais isotérmicas da Tabela 5.2, sem reação química, foram obtidas através do sistema LDA (*Laser Doppler Anemometry*) da fabricante DANTEC, obtidas a 16 mm, 45 mm, 79 mm, 113 mm, 147 mm, 181 mm e 215 mm do injetor e radialmente até 35 mm do eixo central.

Considerando uma análise numérica, torna-se extremamente complexo determinar em qual setor foram realizadas as medidas experimentais, para efeitos de validação. Uma solução para corrigir possíveis erros, mostrada na Figura 5.3b, é obter os dados através de planos concêntricos, que abrangem todo o setor, de forma a caracterizar adequadamente quaisquer particularidades do campo de escoamento.



(a)

(b)

Figura 5.3 Esquema do posicionamento das medidas experimentais nos planos radiais  
(a) medidas realizadas e (b) sugestão de amostras.

### 5.3 Condições experimentais utilizadas

As diversas condições experimentais avaliadas por Veríssimo (2011) estão reunidas na Tabela 5.1 e Tabela 5.2, sendo esta referente a condição isotérmica investigada. Os diversos cenários mostrados serão utilizados durante a comparação dos resultados.

Tabela 5.1 Condições experimentais de combustão realizadas (VERÍSSIMO, 2011).

Teste	Diâm. injetor $\phi_{ar}$ (mm)	Excesso de ar $\lambda$ (-)	T (°C)	Carga térmica (kW)	$V_{ar}$ (m/s)	$V_{comb}$ (m/s)	Quantidade de movimento (N)		Tempo de residência (s)
							Ar	Comb.	
1	10	1,1	400	10	92,4	6,1	0,38	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1531
2	10	1,3	400	10	109,1	6,1	0,52	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1313
3	10	1,5	400	10	125,8	6,1	0,65	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1149
4	10	1,7	400	10	142,5	6,1	0,83	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1022
5	10	1,9	400	10	159,2	6,1	1,08	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,0921
6	10	2,1	400	10	175,9	6,1	1,30	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,0837
7	10	2,2	400	10	184,2	6,1	1,39	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,0801
8	10	1,3	100	10	60,4	6,1	0,29	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1314
9	10	1,3	200	10	76,7	6,1	0,37	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1314
10	10	1,3	300	10	92,9	6,1	0,45	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1314
11	10	1,3	500	10	125,3	6,1	0,60	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1313
12	10	1,3	600	10	141,5	6,1	0,62	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1312
13	10	1,3	700	10	157,7	6,1	0,68	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1311
14	10	1,3	400	7	81,9	4,3	0,28	6,0x10 <sup>-4</sup>	0,1755
15	10	1,3	400	8	87,1	4,9	0,31	7,8x10 <sup>-4</sup>	0,1643
16	10	1,3	400	9	98,1	5,5	0,40	9,8x10 <sup>-4</sup>	0,1458
17	10	1,3	400	11	120	6,7	0,59	14,7x10 <sup>-4</sup>	0,1191
18	10	1,3	400	12	122,5	7,3	0,60	17,5x10 <sup>-4</sup>	0,1181
19	10	1,3	400	13	131	7,9	0,71	20,6x10 <sup>-4</sup>	0,1087
20	9	1,3	400	10	134,6	6,1	0,61	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1313
21	8	1,3	400	10	170,4	6,1	0,77	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1313
22	7	1,3	400	10	223,6	6,1	1,01	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1306
23	6	1,3	400	10	303,0	6,1	1,36	12,2x10 <sup>-4</sup>	0,1313

O termo  $i$  na Tabela 5.2 representa a condição isotérmica do correspondente teste citado na Tabela 5.1. Foram realizadas inicialmente simulações com os parâmetros do teste 2i, de modo a observar o comportamento do escoamento, bem como a influência das condições iniciais de turbulência, avaliando os parâmetros  $k$ ,  $\epsilon$  e intensidade da turbulência, ao longo do perfil do escoamento na região de entrada. Estes parâmetros devem ser definidos no início das

simulações a fim de promover um perfil próximo do experimental, além de colaborar com o processo de convergência. Outra vantagem das simulações isotérmicas está na possibilidade de análise da sensibilidade de malha no resultado, além de verificar algumas considerações, tais como periodicidade.

Ainda de acordo com a Tabela 5.2, os valores de temperatura e velocidade do ar,  $T_{ar}$  e  $V_{ar}$ , são relativos à região de entrada do queimador.

Tabela 5.2 Condições experimentais isotérmicas realizadas (VERÍSSIMO, 2011).

Teste	Diâm. injetor $\phi_{ar}$ (mm)	Excesso de ar $\lambda$ (-)	$T_{ar}$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	$V_{ar}$ (m/s)	$V_{comb}$ (m/s)
2i	10	1,3	25	52,2	6,1
4i	10	1,7	25	62,9	6,1
6i	10	2,1	25	77,7	6,1
22i	7	1,3	25	98,2	6,1
23i	6	1,3	25	133,7	6,1

Foram feitos testes experimentais observando a coeficiente de excesso de ar, ou seja, do teste 1 a 7 mostrado na Tabela 5.1, cujas emissões de  $\text{NO}_x$  e CO são apresentadas na Figura 5.4.

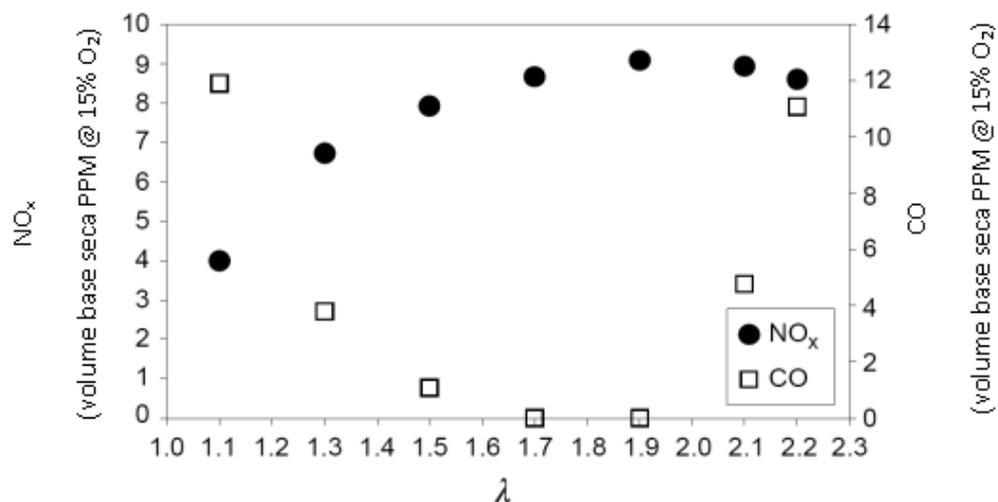


Figura 5.4 Emissões de  $\text{NO}_x$  e CO em função do coeficiente de excesso de ar (VERÍSSIMO, 2011).

Ainda de acordo com os testes de 1 a 7 da Tabela 5.1, são mostradas na Figura 5.5, imagens da região de queima considerando a variação do coeficiente de excesso de ar.

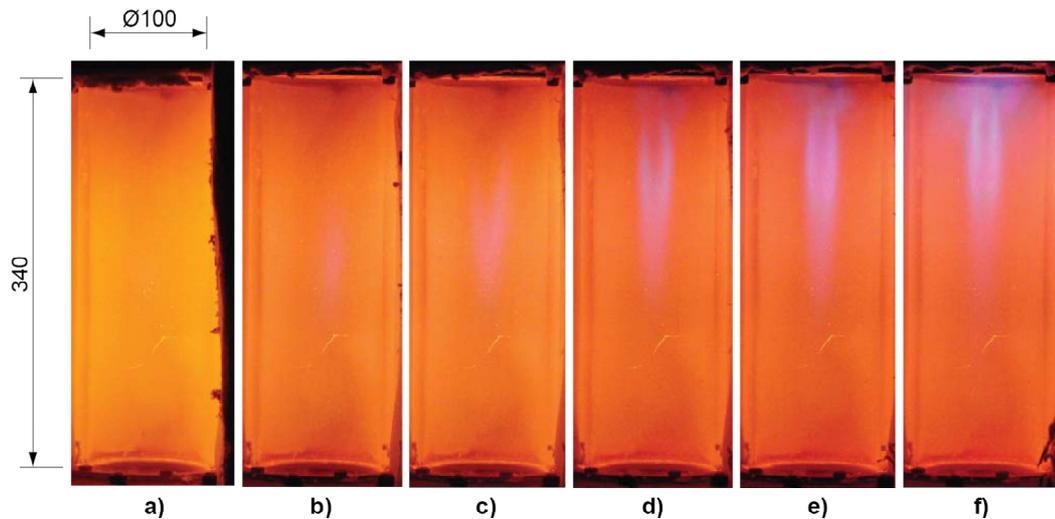


Figura 5.5 Aparência do modo de combustão ao longo do queimador para diferentes  $\lambda$ .

(a)  $\lambda = 1,1$ ; (b)  $\lambda = 1,3$ ; (c)  $\lambda = 1,5$ ; (d)  $\lambda = 1,7$ ; (e)  $\lambda = 1,9$  e (f)  $\lambda = 2,1$ .

(VERÍSSIMO, 2011).

Pode-se observar pela Figura 5.5, que após seguidos aumentos do coeficiente de excesso de ar, ocorre a formação de uma frente de chama, embora muito diluída, próxima a região de injeção do queimador, o que ainda pode ser considerada uma combustão Sem Chama Visível, pois ainda não se tem um núcleo de chama nem tampouco uma frente definida.

Diante dos resultados dos testes apresentados, um perfil detalhado dos resultados obtidos para o teste 2, cujo regime de combustão Sem Chama Visível foi atingido segundo Veríssimo (2011), conforme evidenciado pela Figura 5.5, está mostrado na Figura 5.6 e Figura 5.7. Nelas estão apresentadas as concentrações medidas ao longo do comprimento do queimador, representado pelo eixo  $z$ .

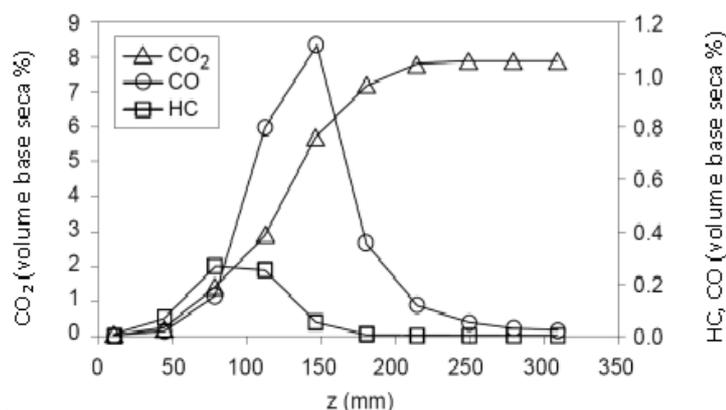


Figura 5.6 Perfis axiais de temperatura e concentração de espécies químicas em função da coordenada  $z$  (CO<sub>2</sub>, CO e HC) para  $\lambda = 1,3$  (teste 2) (VERÍSSIMO, 2011).

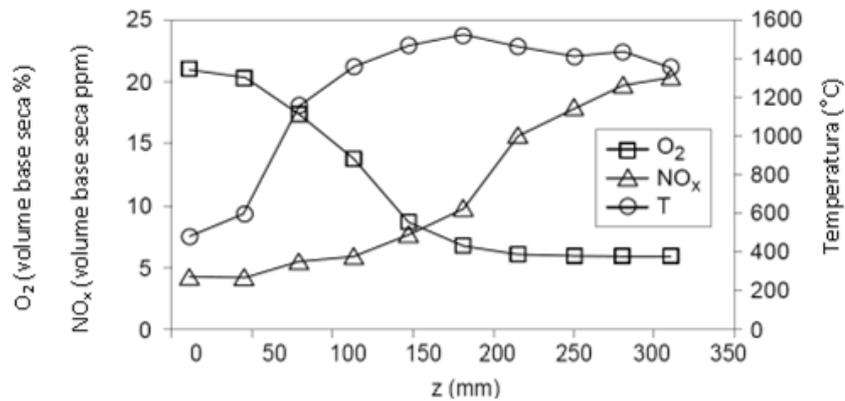


Figura 5.7 Perfis axiais de temperatura e concentração de espécies químicas em função da coordenada  $z$ , para  $\lambda = 1,3$  (teste 2) (VERÍSSIMO, 2011).

A Figura 5.8 apresenta os resultados experimentais variando a velocidade de injeção do ar, sendo o regime Sem Chama Visível obtido em todas as condições. Nota-se pela Figura 5.8 uma redução nas emissões de  $\text{NO}_x$  a medida que se aumentou a velocidade de injeção do ar, obtido através da redução do diâmetro do injetor de ar, sem aumento do excesso de ar conforme resultados da Figura 5.4. Quanto à redução na emissão de  $\text{NO}_x$ , ela pode ser interpretada como resultado pela melhoria no processo de mistura no interior do queimador, em virtude do aumento da taxa de recirculação interna criado pelas velocidades cada vez elevadas e do perfil de temperaturas mais baixas, conforme pode ser observado pela Figura 5.7.

Nota-se pela Figura 5.8 um aumento das emissões de CO em virtude do aumento no tempo de permanência dos gases no interior do queimador, considerando que a maior parte da formação deste poluente ocorre quando a tempo de reação é lento.

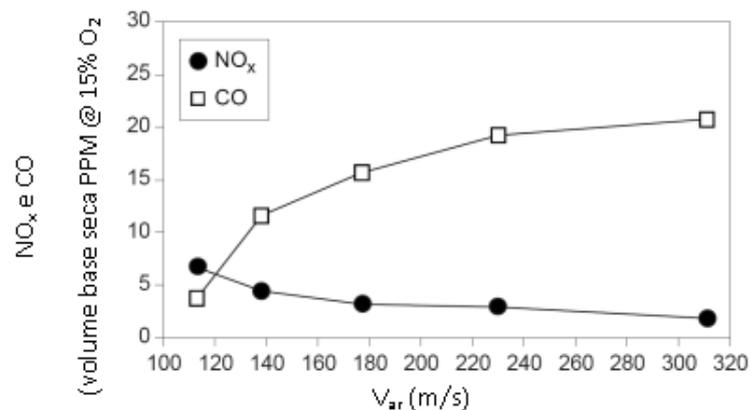


Figura 5.8 Concentração de espécies químicas ( $\text{NO}_x$  e CO) para  $\lambda = 1,3$  (teste 2) mediante variação da velocidade de injeção do ar ao longo do queimador (VERÍSSIMO *et al.*, 2012).

## Capítulo 6

# SIMULAÇÃO NUMÉRICA: RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos pelas simulações numéricas realizadas, iniciando com uma discussão sobre a sensibilidade ou dependência da malha nos resultados, que pode prejudicar a obtenção de resultados confiáveis.

### 6.1 Introdução

O domínio de estudo, conforme visto no Capítulo 5, apesar de possuir uma geometria simples, dependendo das condições de entrada e dos modelos numéricos utilizados, surgiram pequenas turbulências e vórtices muito próximos da região de saída, possibilitando o aparecimento de fluxos reversos. Foi observado, através das simulações realizadas, que o fenômeno ocorre numa região do queimador após a forte recirculação. Logo, apesar da solução caminhar para a convergência, o resultado obtido não tem validade física, neste caso apenas convergência numérica, visto que a presença de fluxo reverso pode não reproduzir o teste experimental.

Durante pesquisas sobre a ocorrência do fluxo reverso em fóruns especializados no assunto, pesquisadores afirmam que, em alguns casos, o programa computacional cria

virtualmente este fluxo reverso, de modo a melhorar o processo de convergência. Neste caso, após algumas iterações, o fluxo reverso tende a desaparecer. Porém, caso o fluxo reverso permaneça durante várias iterações e em um número grande de faces do domínio, pesquisadores comentam sobre a possibilidade de erros na escolha das condições iniciais do escoamento nas regiões de entrada e saída, utilizadas em seguida para a inicialização do problema. Nas simulações numéricas realizadas as condições iniciais foram definidas com auxílio do programa ANSYS Fluent® a partir da região de injeção de ar, pelo fato de representar ao escoamento o maior momento.

Foi observado que tanto a presença de fluxo reverso quanto sua permanência durante a simulação varia de acordo com o modelo de turbulência considerado, em parte pela própria característica do modelo, por exemplo, quanto ao número de equações de transporte ou método de cálculo empregado.

Com o objetivo de investigar a permanência de fluxo reverso, foi modificada a pressão de saída atribuída nas condições iniciais, uma vez que do ensaio sabe-se apenas que o fluxo de saída é enviado a um lavador de gases mantido à pressão atmosférica. Neste caso, baseando nos dados experimentais isotérmicos para o campo de velocidade, foram testados valores acima da pressão atmosférica, até 1 bar, de modo a garantir que o fluxo na saída direcione-se corretamente para o lavador de gases, impedindo a formação de fluxos reversos. Contudo, pode ser observado que o aumento da pressão de saída, deslocou fortemente o escoamento para o interior do queimador, afetando negativamente a distribuição e a magnitude das velocidades numéricas. Assim, atribuindo nas simulações a pressão absoluta de 1,07 bar, os resultados numéricos estiveram mais próximos dos dados experimentais. Uma comparação entre duas simulações realizadas, mostrando detalhes do fluxo reverso está mostrado na Figura 6.1.

Após a análise feita anteriormente, o fluxo reverso permaneceu em alguns modelos de turbulência, principalmente  $k-\epsilon$  *Realizable* (KER), aumentando a medida que se refinava o tamanho do elemento de malha, dificultando principalmente a análise de sensibilidade da malha.

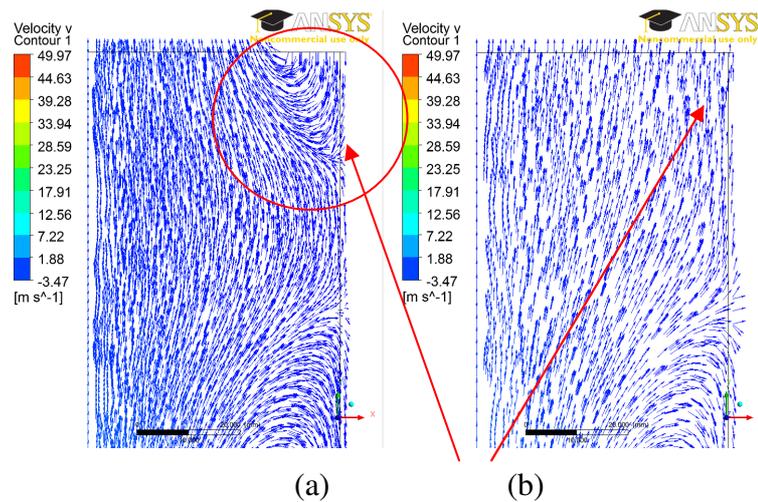


Figura 6.1 Comparativo do fluxo reverso identificado nas simulações:  
(a) presença (b) ausência.

Diante desta situação, foi empregada a seguinte estratégia, baseada em pesquisas nos fóruns de CFD e na própria experiência:

1) Iniciar a simulação com *discretização espacial de Primeira Ordem* (em ANSYS Fluent®: *Solution Methods/Spatial Discretization/First Order Upwind*) para o Momento, Energia Cinética Turbulenta, Taxa de Dissipação Turbulenta e Energia.

2) Dependendo das características do domínio e do número de elementos da malha, podem surgir vários fluxos reversos na região de saída, o que podem ser minimizados com a escolha inicial da opção *Outflow* no ANSYS Fluent® para a condição de saída, ao invés de *Pressure Outlet*. Neste caso, com a escolha de 100 % da massa atravessando a fronteira (*Mass Weighted = 1*), o escoamento é considerado pelo programa como totalmente desenvolvido e deverá reduzir o número de faces com fluxos reversos. A escolha *Outflow* pode ser utilizada nos casos onde se desconhece a condição de saída, seja em termos da pressão ou da velocidade de saída (ANSYS INC., 2011).

3) Após extinta ou reduzida a quantidade de fluxos reversos, retorna-se a condição de *Pressure Outlet*. Alguns poucos fluxos reversos devem aparecer, porém rapidamente serão eliminados.

4) Atribuir a discretização espacial de Segunda Ordem, em ANSYS Fluent®, *Second Order Upwind*, de modo a garantir resultados mais confiáveis. De acordo com a Figura 6.2, observa-se a distribuição dos residuais de momento, energia e continuidade, após mudança para solução com segunda ordem, mostrando que a solução busca a convergência de modo mais acentuado. Em todas as simulações realizadas foram verificados se os residuais estavam baixos e se as grandezas na saída do queimador não sofriam variação significativa.

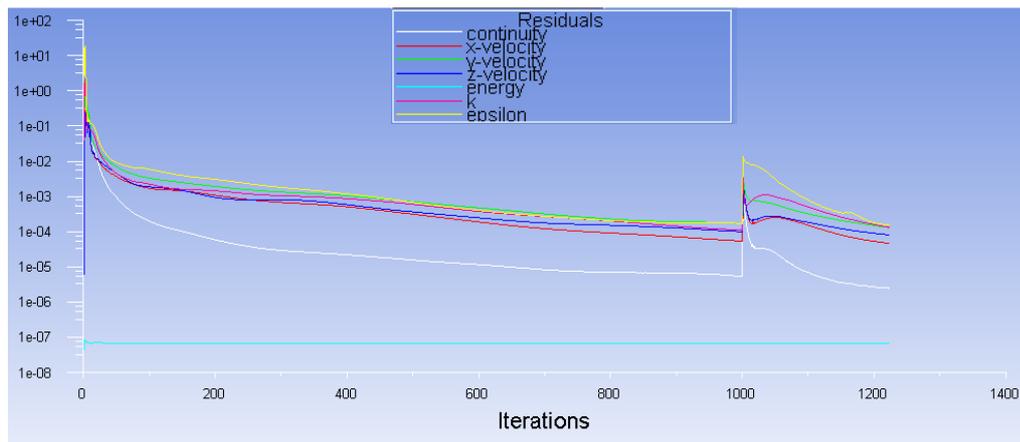


Figura 6.2 Distribuição dos resíduos em *Second Order Upwind*.

## 6.2 Análise de Periodicidade

Embora os avanços computacionais sejam significativos a cada ano, pesquisadores envolvidos em simulação numérica sempre buscam simplificações através de simetria e condições de periodicidade. Neste último, condições aerodinâmicas que atravessam uma dada seção escolhida como periódica serão repetidas na seção oposta, admitindo condições idênticas em todos os setores. Neste ponto, tem-se as maiores fontes de erros, pois o setor considerado pode não representar todo o domínio, levando a aproximações grosseiras do fenômeno real.

No presente trabalho, embora a geometria relativamente simples sugira uma periodicidade, na melhor hipótese um setor contendo um injetor, resultando na divisão da câmara em 1/16, mesmo assim deve ser investigada, pois podem existir fortes distorções pela aerodinâmica interna.

Foi inicialmente investigado um setor do queimador, ou seja, 1/16 da seção total, conforme desenho do *SolidWorks*® mostrado na Figura 6.3, submetido às condições isotérmicas. Nesta, pode-se observar o setor inicialmente investigado contendo apenas um injetor de combustível.

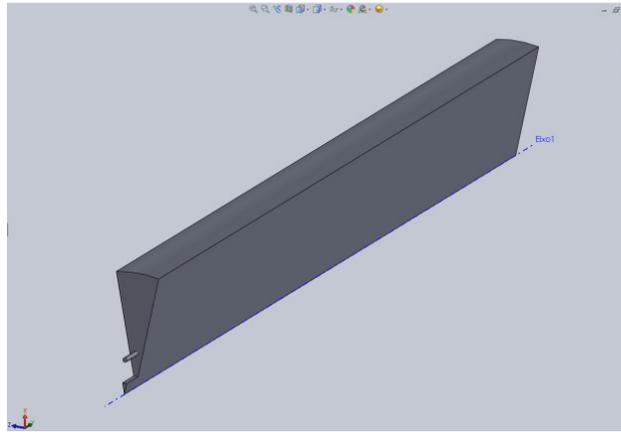


Figura 6.3 Setor correspondente a 1/16 do domínio.

A Figura 6.4 corresponde a simulação isotérmica deste setor, para condição de  $\lambda=1,3$  e temperatura do ar de injeção em 25 °C. Nota-se que o escoamento esteve desenvolvido a partir da região de forte recirculação, não apresentando os fluxos reversos comentados anteriormente. Pode-se ainda observar o centro de uma forte recirculação e uma pequena região próximo a parede, conforme destacados.

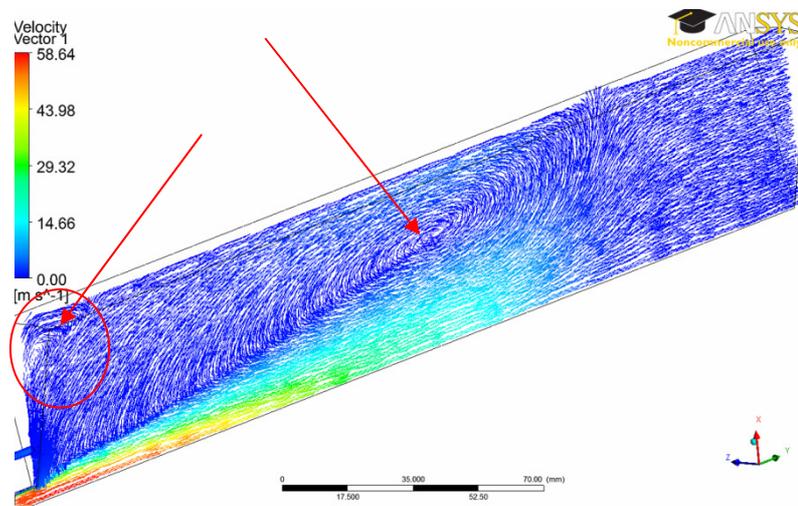


Figura 6.4 Vetores velocidade considerando 1/16 do queimador.

Através da Figura 6.4, apenas pode-se estimar que o escoamento irá se comportar de modo idêntico nos demais setores, até compor o domínio completo. Neste caso, torna-se importante a análise completa do queimador, afim de identificar possíveis variações no escoamento ao longo dos demais setores. O queimador completo, empregado na investigação de periodicidade, está ilustrado na Figura 6.5.

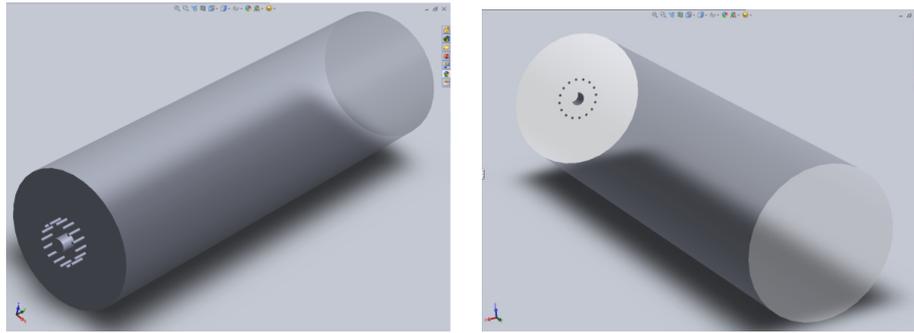


Figura 6.5 Desenho completo em SolidWorks® do queimador.

A Figura 6.6 revela a distribuição dos vetores velocidade num plano longitudinal do queimador completo. Nota-se que a seção superior do plano é muito semelhante ao perfil do escoamento mostrado na Figura 6.4. Contudo na parte inferior, observa-se um perfil de escoamento diferente, com presença de zonas de recirculação secundárias, evidenciando a característica não periódica do escoamento. Logo, considerar o setor representando 1/16 do domínio pode resultar na representação incorreta do escoamento.

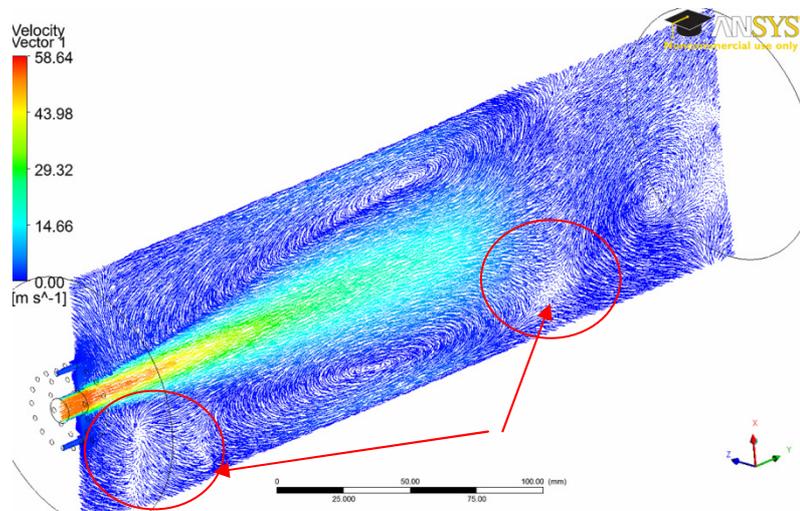


Figura 6.6 Vetores velocidade para o queimador completo

A Figura 6.7 apresenta um comparativo entre os valores experimentais e numéricos, para o vetor velocidade  $v$  (considerado na direção principal do escoamento) ao longo do eixo central do queimador, tanto para o setor quanto o domínio completo. Embora as medidas no eixo central sejam independentes do setor analisado, a simulação numérica envolvendo todo o domínio irá afetar o escoamento nesta região. Diante da Figura 6.7, a simulação numérica considerando o queimador completo, mostrada pela linha contínua preta (iso3x4KESFull), esteve em melhor concordância com os dados experimentais quando comparada a linha que representa o setor (iso3x4KESsetor).

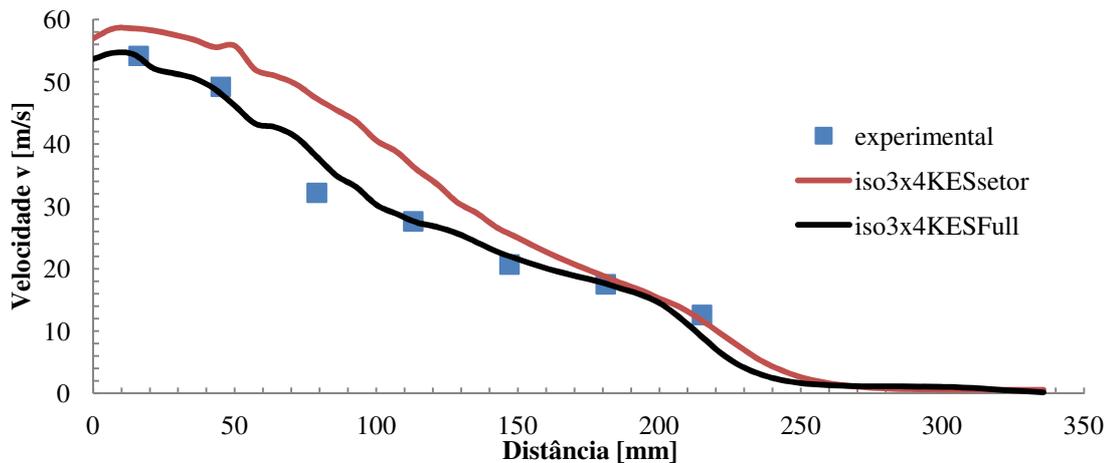


Figura 6.7 Distribuição de velocidade ao longo do eixo central entre setor *versus* completo.

Um dos pontos chave que pode ter influenciado negativamente as simulações envolvendo o setor, distanciando-os dos dados experimentais no eixo central, está na quantidade e qualidade dos elementos de malha presentes nesta região, conforme pode ser observado pela Figura 6.8. Nota-se, em virtude da região de cunha formado pelo setor, que existe uma dificuldade no preenchimento por elementos tetraédricos, o que pode dificultar a solução correta das equações de transporte nesta região.

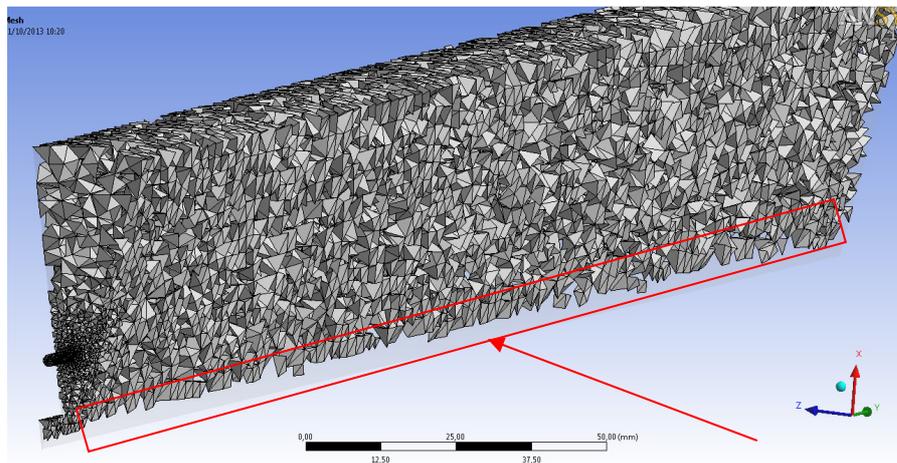


Figura 6.8 Detalhe dos elementos de malha presentes no eixo central.

Foram testadas diversas malhas contendo maior número de elementos, além de um refinamento localizado, principalmente nesta região. No primeiro caso, uma maior quantidade de elementos distribuídos gerou um tempo computacional muito elevado, apesar dos resultados ao longo do eixo central não tenham melhorado substancialmente.

No segundo caso, foi realizado um refinamento empregando elementos menores, de

modo a preencher melhor a região de cunha. Contudo, apesar de visualmente ter resolvido o problema, aumentou o número de fluxos reversos na região de saída. Isto ocorreu devido ao tamanho extremamente reduzido necessário para preencher tal região, o que afetou o refino na região de saída resultando em um número maior de faces para ocorrência dos fluxos reversos.

Outros resultados foram obtidos desta investigação, ao longo de diversos planos traçados, conforme mostrado na Figura 6.9 localizada à 45 mm do injetor. O domínio completo e o setor, estão representados respectivamente pela linha preta (iso3x4KESFull) e linha vermelha (iso3x4KESsetor). Novamente, nota-se que os resultados considerando o domínio completo (iso3x4KESFull) estiveram mais próximos dos resultados experimentais.

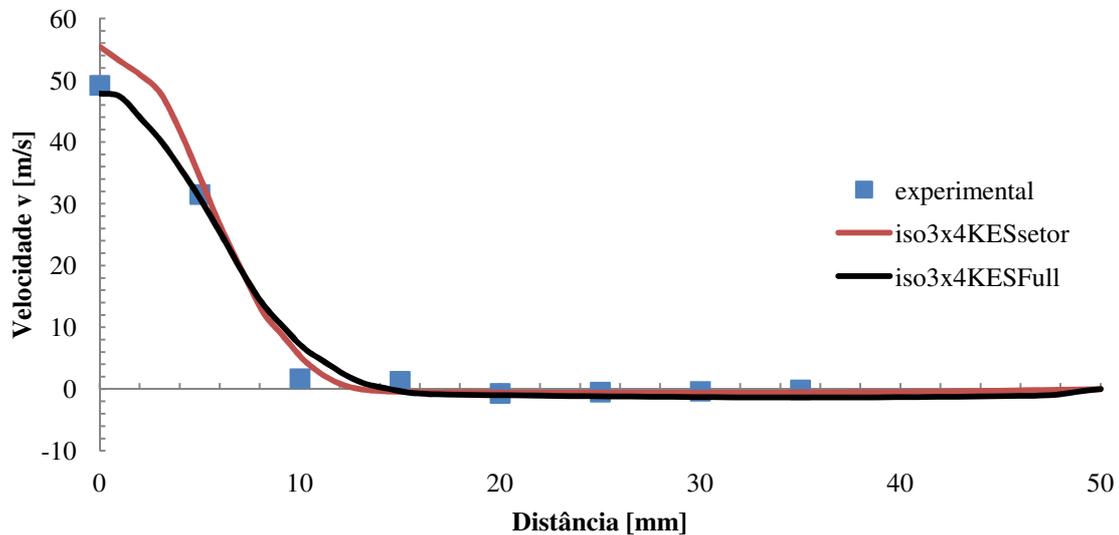


Figura 6.9 Distribuição de velocidade entre setor *versus* completo no plano radial a 45 mm do injetor.

Da Figura 6.10 a Figura 6.14 são apresentados os resultados isotérmicos obtidos nos demais planos radiais. Nota-se que para todos os casos a melhor concordância foi obtida pela simulação envolvendo o queimador completo (iso3x4KESFull).

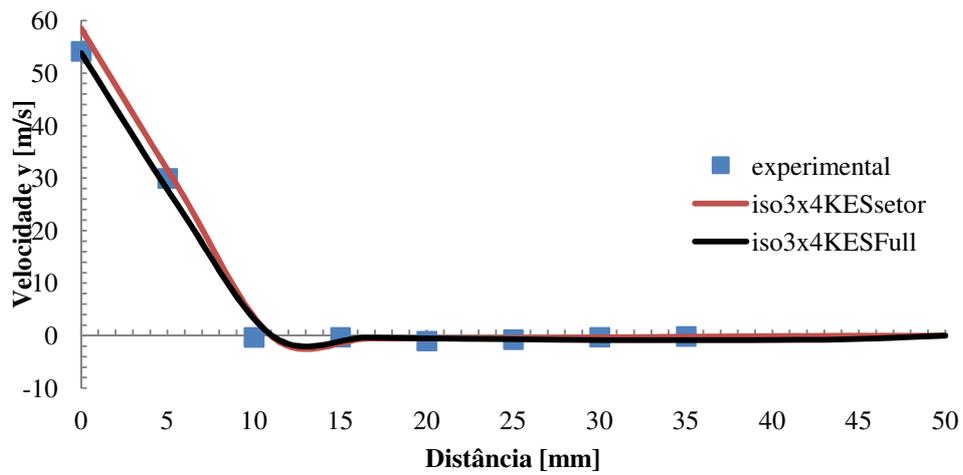


Figura 6.10 Distribuição de velocidade entre setor *versus* completo no plano radial a 16 mm do injetor.

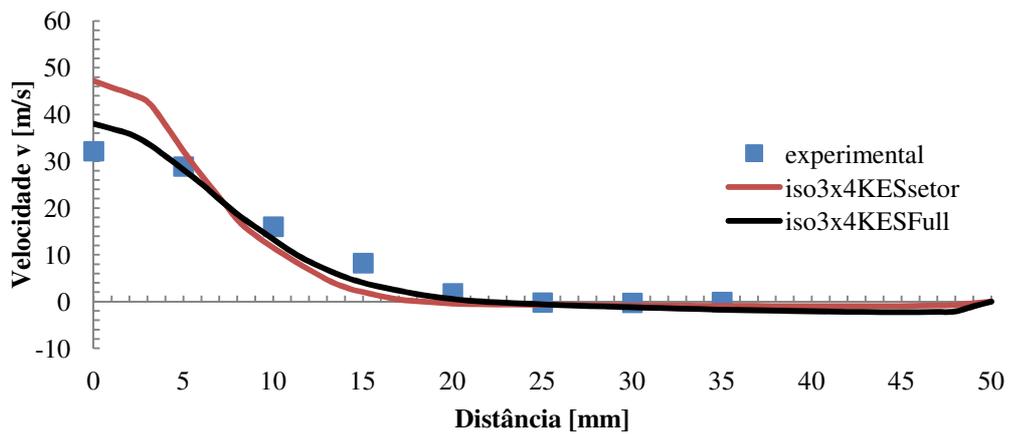


Figura 6.11 Distribuição de velocidade entre setor *versus* completo no plano radial a 79 mm do injetor.

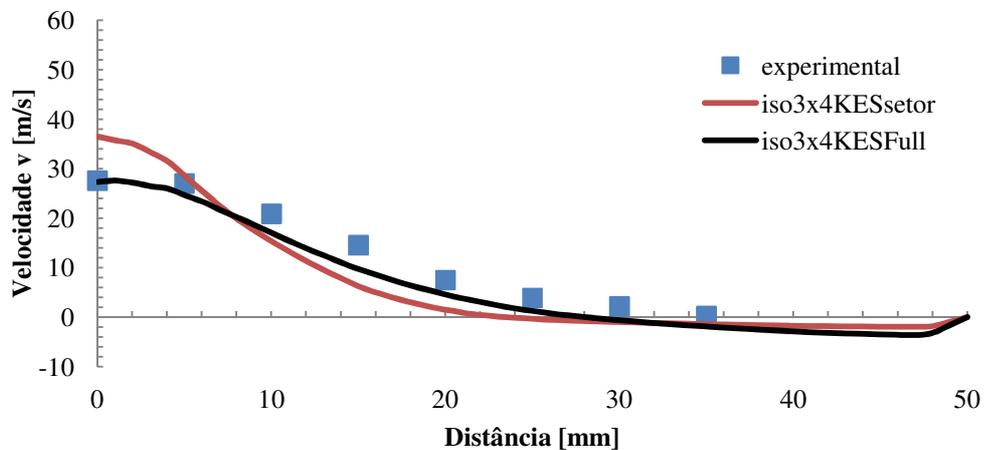


Figura 6.12 Distribuição de velocidade entre setor *versus* completo no plano radial a 113 mm do injetor.

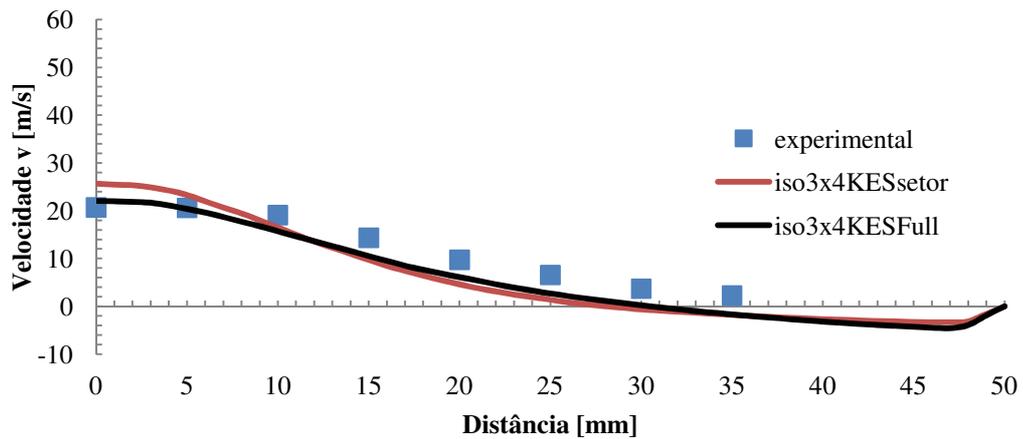


Figura 6.13 Distribuição de velocidade entre setor *versus* completo no plano radial a 147 mm do injetor.

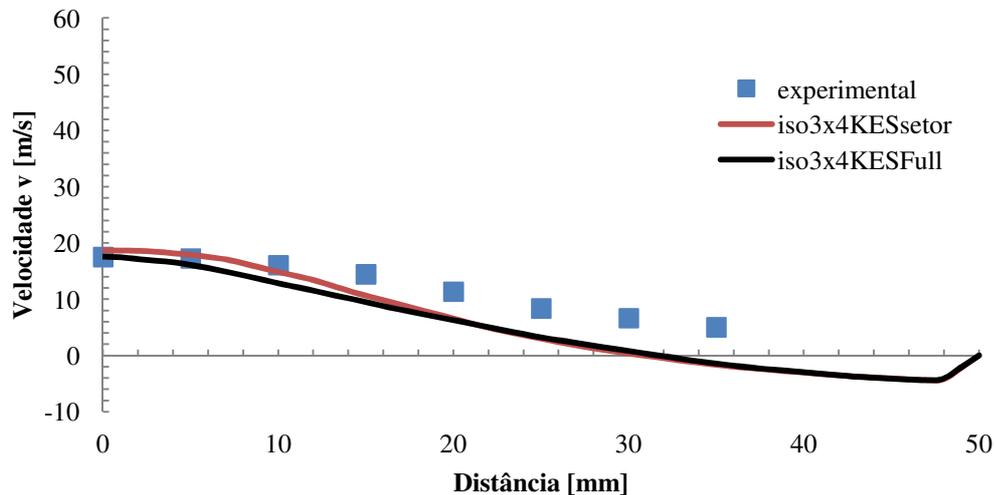


Figura 6.14 Distribuição de velocidade entre setor *versus* completo no plano radial a 181 mm do injetor.

Foram ainda observados os resultados numéricos da distribuição dos vetores velocidade em outras posições, dividindo o domínio completo em oito partes. Contudo os resultados obtidos não apresentaram variação significativa nos valores.

Em vista do maior esforço computacional exigido na simulação numérica completa do queimador, novas soluções devem ser investigadas. Logo, visando também as simulações futuras envolvendo reações químicas, o tempo computacional gasto tende a aumentar muito, em comparação com a condição isotérmica, onde apenas a aerodinâmica é analisada, podendo assim inviabilizar o processo de simulação. Como exemplo, o tempo computacional gasto para simulação numérica isotérmica deste queimador em um computador comum, com 16 GB de memória RAM e processador Intel Core i7-2600 de 3,40 GHz, é de aproximadamente 3

horas para 2500 iterações, sendo que para combustão, este tempo sobe para mais de 40 horas. Ao final destas iterações, tanto os residuais eram baixos, na ordem de  $10^{-6}$ , quanto as grandezas na saída do queimador que não tiveram variação significativa dos valores.

Na Figura 6.15 é representada a metade do queimador, obtida pelo programa ANSYS *Meshing*®, juntamente com as regiões definidas. Na região denominada *Symmetry* (E) indicada, a condição de simetria do domínio foi imposta ao programa ANSYS *Fluent*®, de modo a minimizar o tempo computacional gasto na execução dos cálculos.

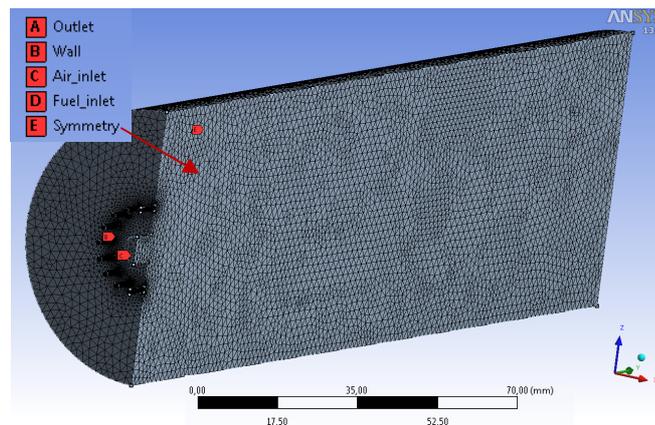


Figura 6.15 Malha empregada nas simulações envolvendo a metade do queimador.

A distribuição dos vetores velocidade ao longo do plano longitudinal estão apresentados na Figura 6.16. Pode-se observar que o escoamento na parte superior do domínio é semelhante ao setor e aos resultados para queimador completo. Contudo, na parte inferior, nota-se um comportamento diferente, em comparação com a condição de setor, reforçando que a condição de periodicidade para um setor de 1/16 não reproduz fielmente o escoamento.

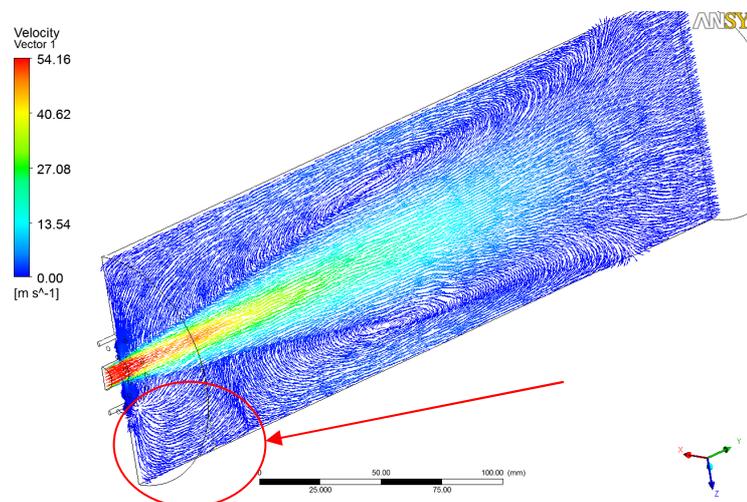


Figura 6.16 Vetores ao longo do plano longitudinal para a metade do domínio.

Na Figura 6.17, são apresentados a distribuição dos vetores velocidade  $v$  ao longo do eixo central. Nota-se que o comportamento dos vetores velocidade é semelhante quando se considera o queimador completo, porém mediante um esforço computacional menor. Além disso, a escolha da metade do domínio reduz a enorme simplificação trazida pela análise de apenas um setor de 1/16.

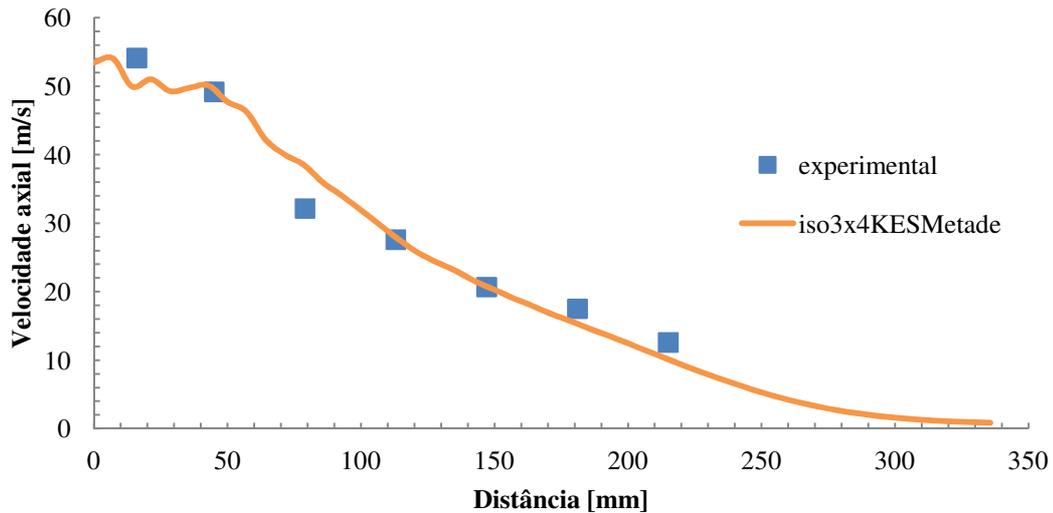


Figura 6.17 Distribuição de velocidade para a metade do queimador ao longo do eixo central.

Os resultados numéricos num plano radial a 45 mm do injetor estão apresentados na Figura 6.18, enfatizando a boa concordância com os dados experimentais disponíveis.

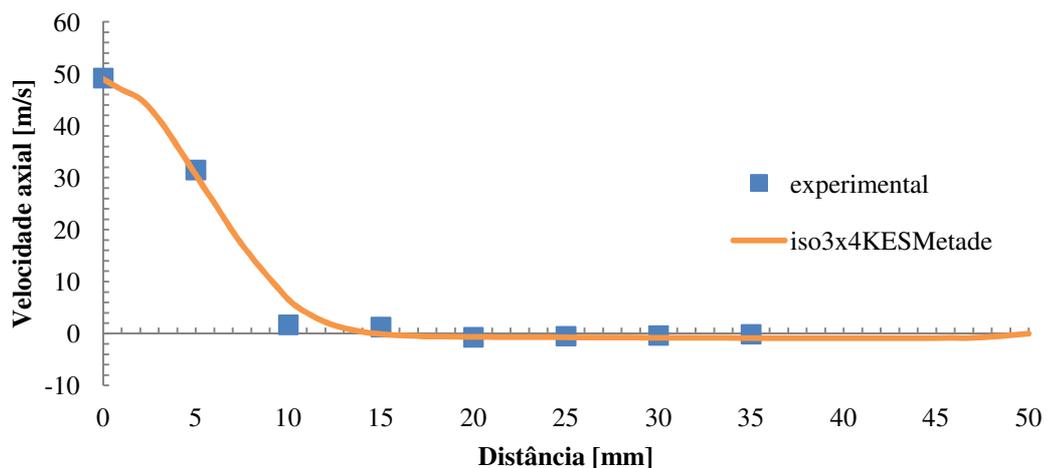


Figura 6.18 Distribuição de velocidade para metade do queimador no plano radial a 45 mm do injetor.

Diante dos resultados obtidos através da análise da sensibilidade, pode-se concluir que

as simulações numéricas da metade do queimador apresentou boa concordância com os resultados experimentais além de um tempo computacional menor, o que representa uma boa escolha para este trabalho.

### 6.3 Independência de malha

A verificação de independência de malha representa uma importante parte do processo de simulação numérica. Através dela, verifica-se a independência dos resultados em função da resolução da malha, ou seja, do tamanho e número dos elementos que a compõem. É sabido que os erros numéricos provenientes da discretização das equações de conservação são minimizados a medida que ocorre o refinamento da malha, ou seja, parte do princípio de que quanto mais pontos são empregados no cálculo do resultado, mais preciso ele será. Contudo, erros numéricos do próprio processo iterativo ou provenientes do método de cálculo empregado pelo programa computacional, tendem a aumentar, a medida que mais pontos são empregados. Logo, existe um limite para o número de elementos empregados, onde tanto os erros da discretização quanto do método de cálculo são razoáveis e resultam em boa concordância com o fenômeno físico estudado.

Neste caso, quando é alcançada uma solução independente da malha, mesmo reduzindo o tamanho da malha, nenhuma variação significativa deve ser obtida nos resultados finais. Assim, a malha usada nas simulações deve ser refinada o suficiente para assegurar que a solução não seja dependente das aproximações do esquema de discretização.

Para avaliar a sensibilidade da malha, foram selecionadas três malhas com diferentes resoluções, cujas características estão descritas a seguir:

- Malha grossa
- Malha fina
- Malha superfina

As malhas foram criadas pelo programa ANSYS *Meshing*®, disponível no pacote ANSYS *Workbench*®, variando o tamanho máximo na face (*max face element*) e no domínio (*max face*), para cada malha desejada, nomeando as regiões de interesse para facilitar a aplicação das condições iniciais e de contorno, posteriormente.

O estudo da independência de malha foi realizado comparando os resultados numéricos

obtidos para diferentes densidades de malha com os resultados experimentais, fornecidos por Veríssimo (2012) para uma condição isotérmica. O uso da condição isotérmica se deve pela ausência de dados experimentais relativos às velocidades nas condições de combustão, porém são suficiente para a previsão da estabilidade da malha.

Durante as análises, foi escolhido o modelo de turbulência KES pela sua robustez na solução dos mais diversos escoamentos encontrados na indústria, bem como aplicações na modelagem do regime de combustão Sem Chama Visível.

### 6.3.1 Malha grossa

A malha grossa foi obtida com elementos 8 mm e 12 mm, correspondendo respectivamente ao máximo tamanho na face e no geral, no ANSYS Meshing® em *max face size* e *max size*. Tal escolha resultou em uma malha grosseira, contendo 29.819 nós e 144.956 elementos, conforme pode ser observado pela Figura 6.19. Nota-se ainda na Figura 6.19, um refinamento nos injetores de combustível, sugerido pelo próprio ANSYS Meshing®.

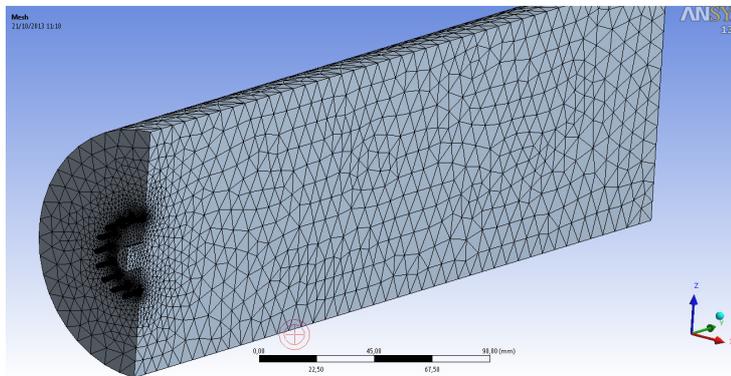


Figura 6.19 Malha grosseira gerada com elementos 8x12 mm.

De acordo com a Figura 6.20, verificando o eixo central, observa-se que os resultados obtidos distanciaram consideravelmente dos dados experimentais, assim como os resultados radiais a 45 mm do injetor na Figura 6.21. O desvio observado na Figura 6.20 e Figura 6.21 é função do número reduzido de elementos utilizados na discretização do domínio, o que exige um refinamento maior.

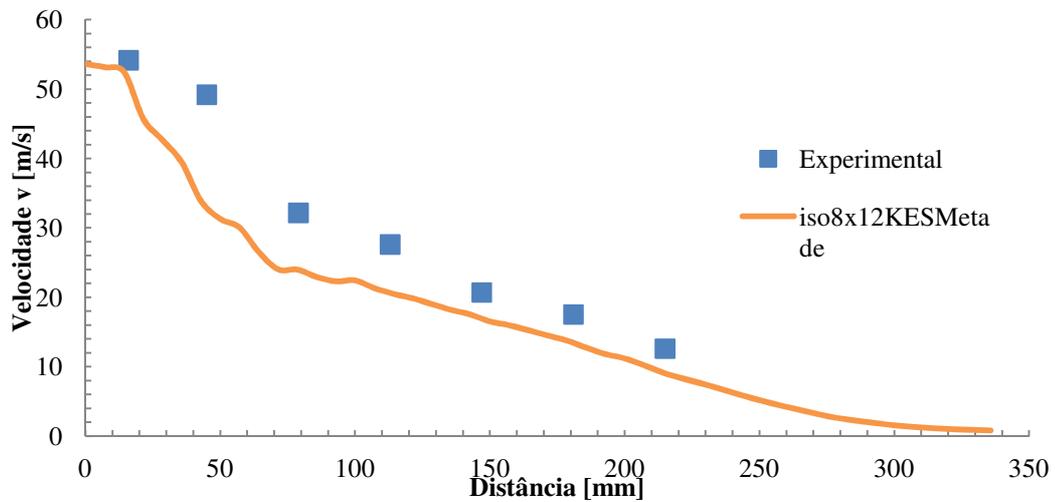


Figura 6.20 Velocidades  $v$  no eixo central na malha grosseira 8x12 mm.

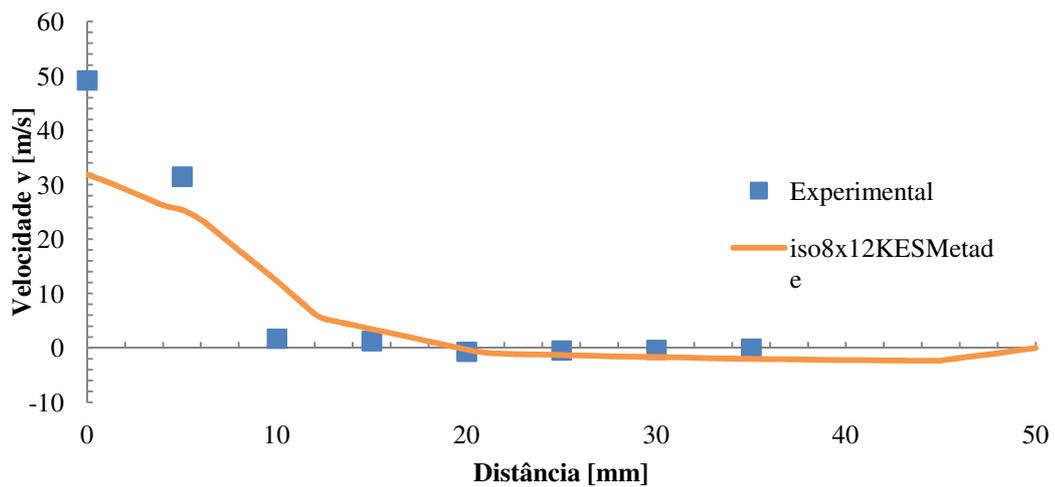


Figura 6.21 Velocidades  $v$  no plano radial a 45 mm do injetor na malha grosseira 8x12 mm.

### 6.3.2 Malha superfina

A malha superfina foi obtida com elementos de 2 mm e 3 mm, resultando em 262.349 nós e 1.463.431 elementos. Nota-se, pela Figura 6.22 que esta escolha gerou uma malha densa, que pode reproduzir mais precisamente o fenômeno ou distanciar em virtude do erro numérico associado. Deve-se analisar ainda, que o tempo computacional exigido será superior e, neste caso, uma malha menos refinada pode ser suficiente.

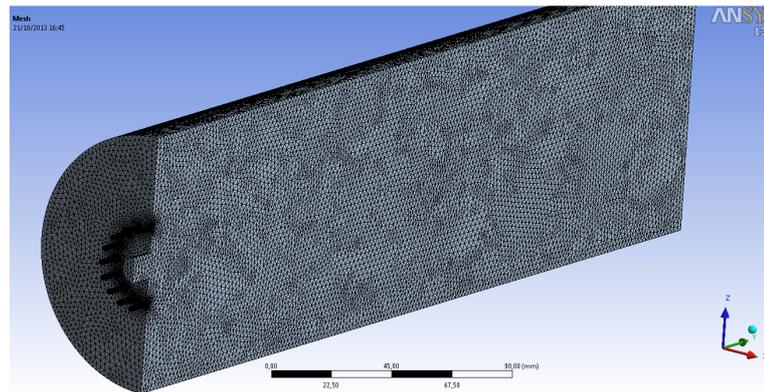


Figura 6.22 Malha superfina gerada com elementos 2x3 mm.

De acordo com a Figura 6.23, observa-se que o final da recirculação ocorreu pouco antes em comparação com os demais tamanhos de malha, o que refletiu na menor velocidade no centro do queimador mostrada na Figura 6.24.

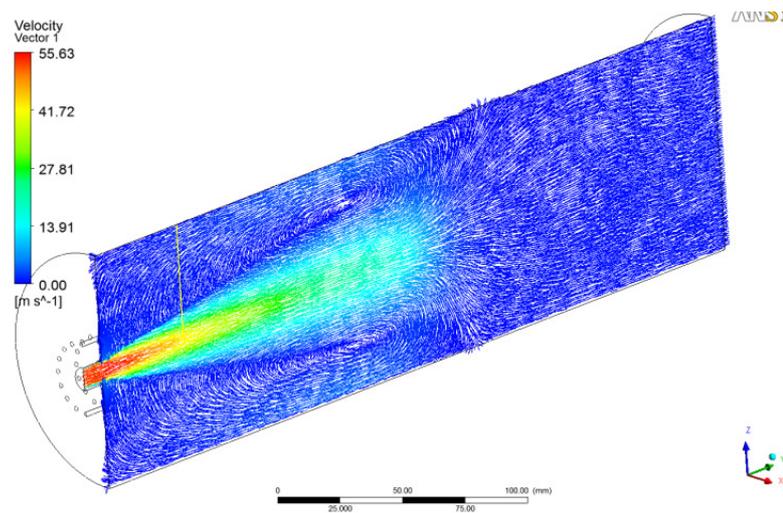


Figura 6.23 Distribuição dos vetores velocidade  $v$  para elementos 2x3 mm.

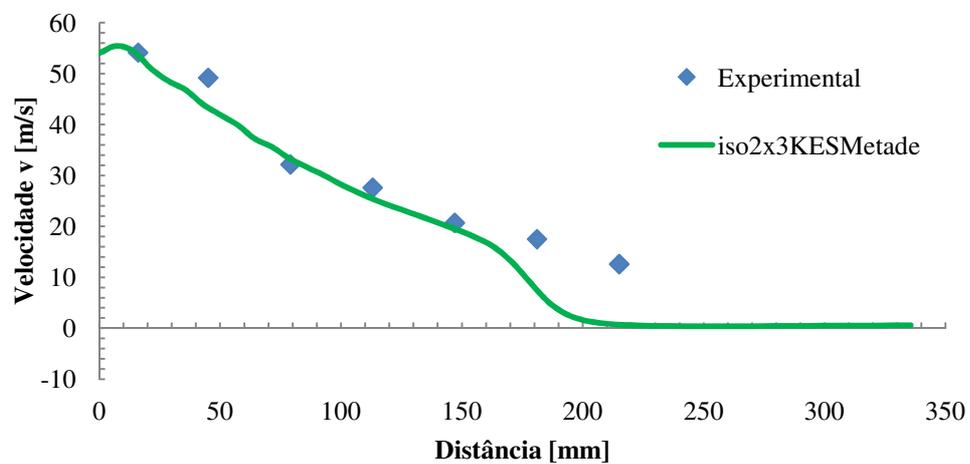


Figura 6.24 Vetores velocidade  $v$  no eixo central na malha superfina 2x3 mm.

Logo, ao final da análise de independência de malha, observou-se que a quantidade de elementos tem grande influência no resultado final e que a malha superfina não apresentou melhores resultados, ainda consumindo maior tempo computacional.

### 6.3.3 Malha fina

Diante dos resultados ruins obtidos tanto para malha grossa quanto com a malha superfina, foi investigado os resultados para uma malha intermediária, que resultou em 97.039 nós e 517.395 elementos, para um tamanho de elemento 3x4 mm. De acordo com a Figura 6.25 e Figura 6.26, tem-se um comparativo entre os resultados obtidos variando apenas o tamanho do elemento empregado na malha. Pode ser observado que a malha 3x4 apresenta melhor concordância aos resultados experimentais, sendo então utilizada em todas as demais simulações deste trabalho. Em todas as simulações, os resultados obtidos apresentaram nível baixo para residuais e variação desprezível para as grandezas ao longo do plano de saída do queimador.

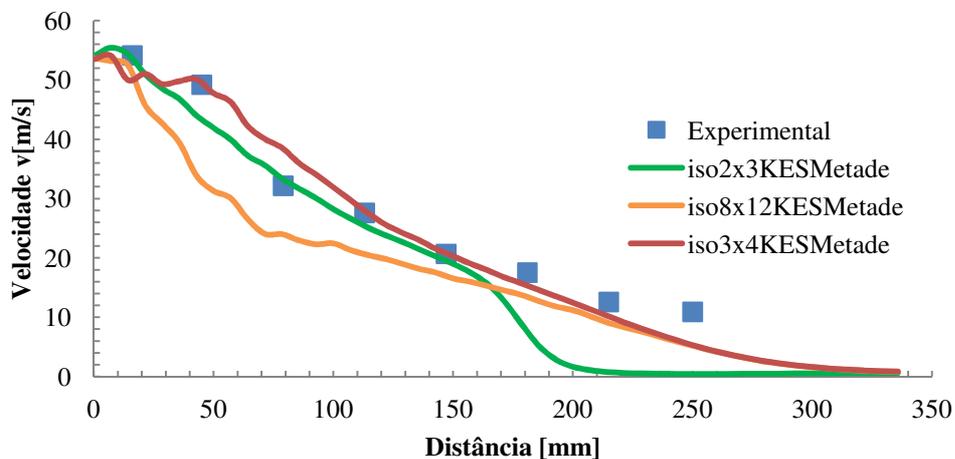


Figura 6.25 Comparativo dos vetores velocidade  $v$  no eixo central em função dos elementos de malha utilizados.

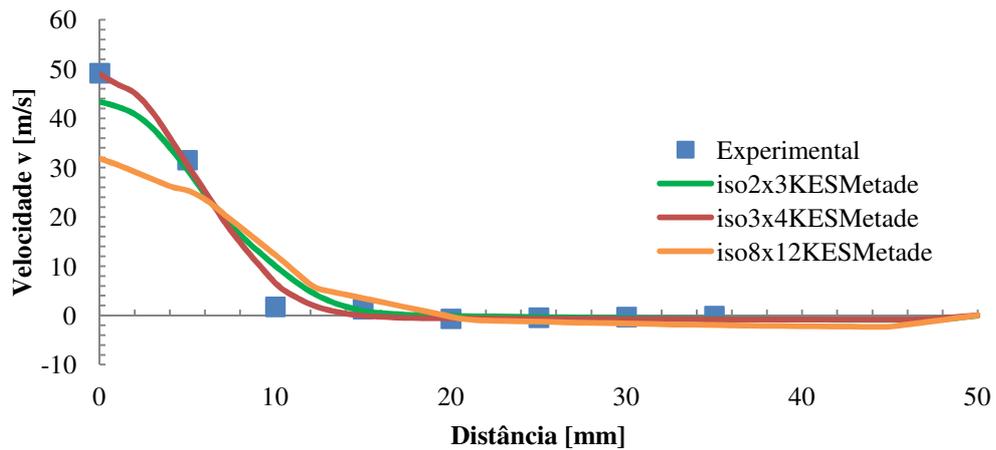


Figura 6.26 Comparativo dos vetores velocidade  $v$  no plano radial a 45 mm do injetor em função dos elementos de malha utilizados.

## 6.4 Análise do Processo de Combustão

A partir dos resultados preliminares realizados para a condição isotérmica, podem ser identificadas as condições iniciais e de contorno corretas para modelagem do problema, principalmente relativo à turbulência. Dentre outros fatores, foram investigados os parâmetros  $k$  e  $\varepsilon$ , além da intensidade da turbulência, cujo valor inicialmente utilizado foi de 3 %. Para a condição de periodicidade, foi escolhida a metade do queimador, pois teve boa concordância com os dados experimentais aliada a um tempo computacional compatível. Nos testes envolvendo o refinamento da malha, a condição de elemento 3x4 mm com 517.395 elementos foi a escolhida, pelos bons resultados numéricos obtidos. Embora tenham sido apresentados na etapa anterior os resultados relativos ao modelo de turbulência KES, serão também verificados os resultados com modelo de turbulência KER durante o processo de combustão, em virtude das boas características do mesmo na modelagem do regime de combustão Sem Chama Visível.

### 6.4.1 Simulação 1: Condição inicial utilizada (KES/EDC1step/DO)

Diante dos trabalhos pesquisados ao longo da revisão bibliográfica, existe alguns modelos de combustão empregados na modelagem do regime de combustão Sem Chama

Visível, dos quais o modelo recomendado é o EDC, conforme detalhes no item 2.3 desta tese. Para radiação, o modelo de radiação DO é sugerido, embora existam outros disponíveis no programa ANSYS Fluent®. Para a modelagem da turbulência, foi escolhido inicialmente o modelo KES, sendo também previsto testes com o modelo KER. Finalmente, para queima do metano, foi empregado inicialmente o mecanismo de reação global de uma etapa.

A Figura 6.27 e Figura 6.28 apresentam a distribuição dos vetores velocidade considerando a reação de combustão. Nota-se a forte recirculação do escoamento para a região de injeção. De modo a facilitar a identificação, serão mencionados sempre os modelos numéricos empregados na forma KES/EDC/DO, representando o modelo numérico para turbulência, combustão e radiação, respectivamente.

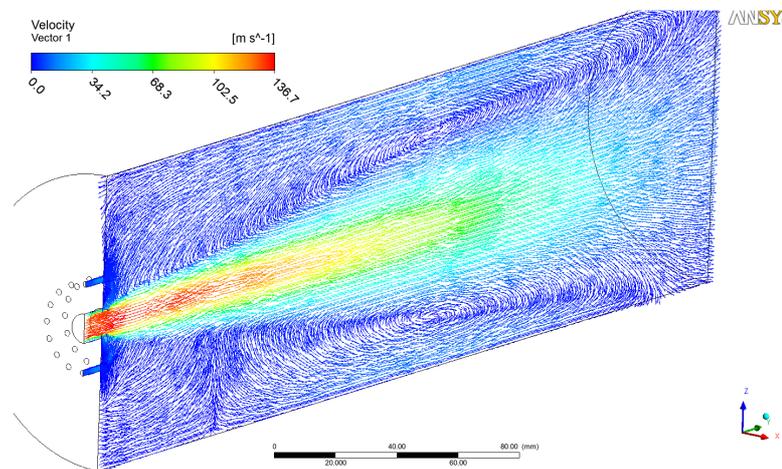


Figura 6.27 Distribuição dos vetores velocidade com combustão (KES/EDC/DO).

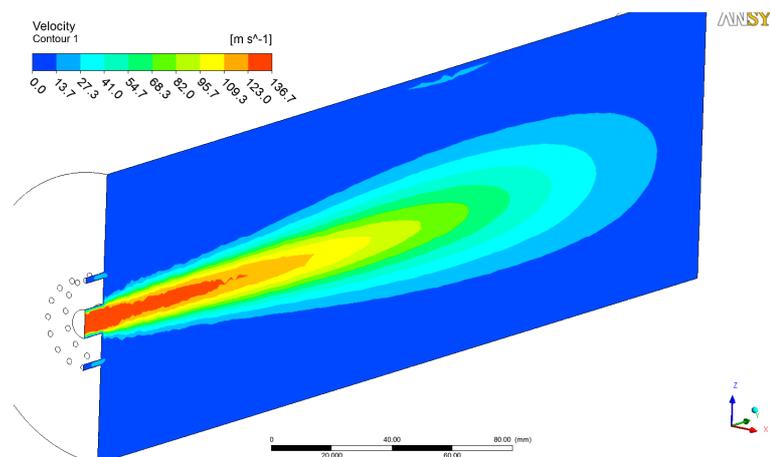


Figura 6.28 Distribuição de velocidade no plano de simetria (KES/EDC1Step/DO).

Diante dos dados experimentais disponíveis para temperatura, os resultado numéricos obtidos são mostrados na Figura 6.29. Nota-se um desvio na região de retorno da recirculação, quando o fluxo encontra-se com os reagentes injetados. Contudo, observa-se que a

temperatura máxima não diferiu muito daquela medida experimentalmente, permanecendo distribuída e homogênea ao longo de todo queimador conforme mostrado na Figura 6.30. É possível identificar ainda a presença de uma ligeira assimetria na distribuição de temperatura da Figura 6.30, assim como em figuras seguintes, possivelmente resultado da forte turbulência desenvolvida no interior do queimador, tornando aleatório o perfil traçado pelo escoamento. Também, foram consideradas em todas simulações desta tese que as propriedades do fluido, tais como condutividade térmica, viscosidade, calor específico dentre outras, fossem tidas como variáveis, em geral segundo leis e polinômios presentes no próprio ANSYS Fluent®, o que pode ter contribuído para resultar em contornos ligeiramente assimétricos.

O desvio mencionado pode ser minimizado com modelos de combustão com cinética mais detalhada, bem como após ajustes nas constantes matemáticas dos modelos. Com relação a pequena flutuação observada na Figura 6.29 até cerca de 80 mm de distância do injetor, isto se deve aos valores numéricos locais que foram tomados diretamente ao longo dos inúmeros nós disponíveis, para fins de construção do gráfico.

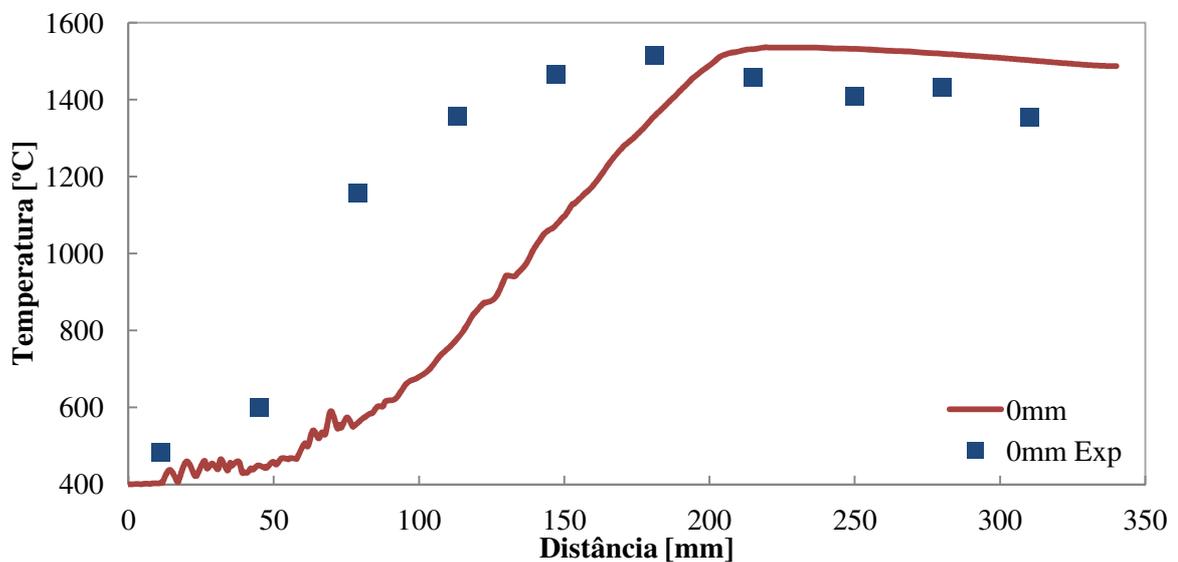


Figura 6.29 Distribuição de temperatura para KES/EDC1step/DO ao longo do eixo central.

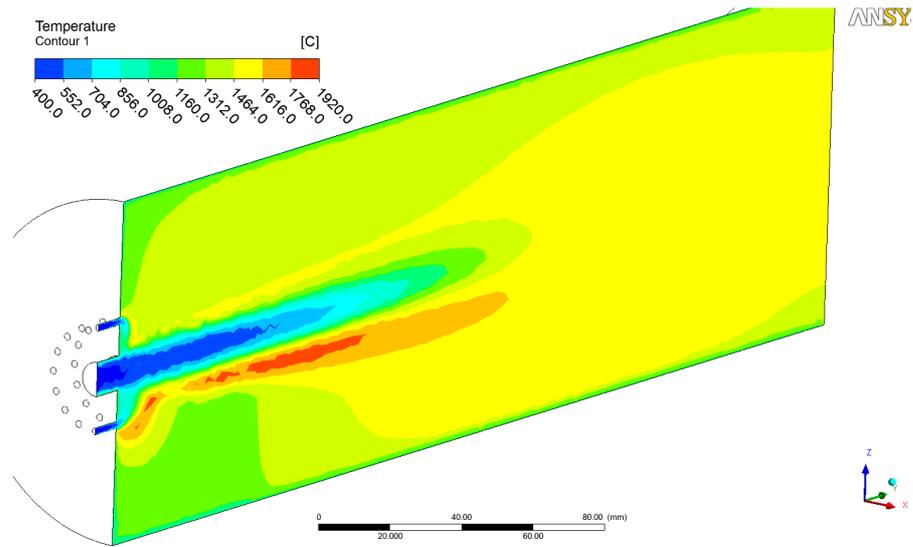


Figura 6.30 Campo de temperatura distribuído no queimador (KES/EDC1Step/DO).

Na Figura 6.31 é apresentado o consumo de  $O_2$  ao longo do plano de simetria do queimador. Nota-se, uma presença reduzida e homogênea de  $O_2$  na maior parte do queimador, evidenciando uma das características marcantes do regime de combustão Sem Chama Visível.

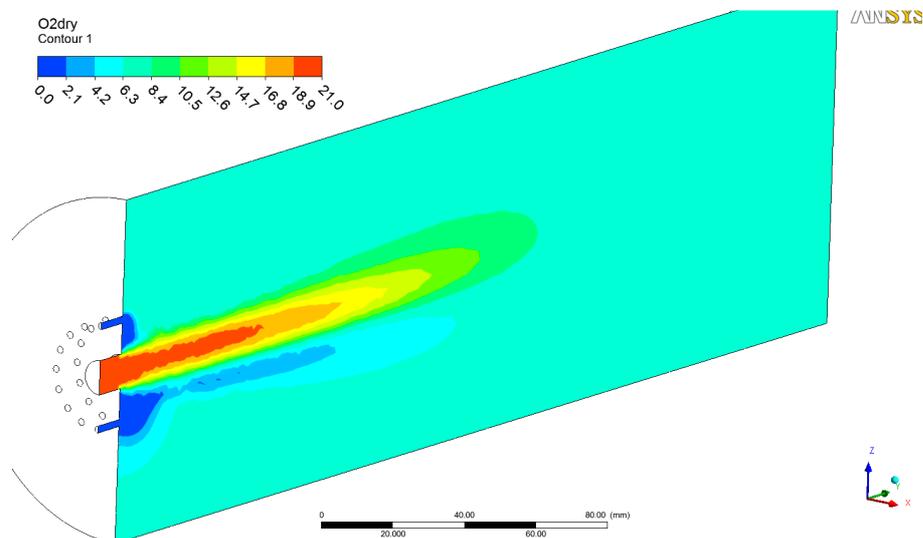


Figura 6.31 Consumo de  $O_2$  base seca para KES/EDC1step/DO.

No eixo central do queimador, a distribuição de oxigênio em base seca é mostrada na Figura 6.32, mostrando o afastamento dos resultados numéricos após 79 mm do injetor.

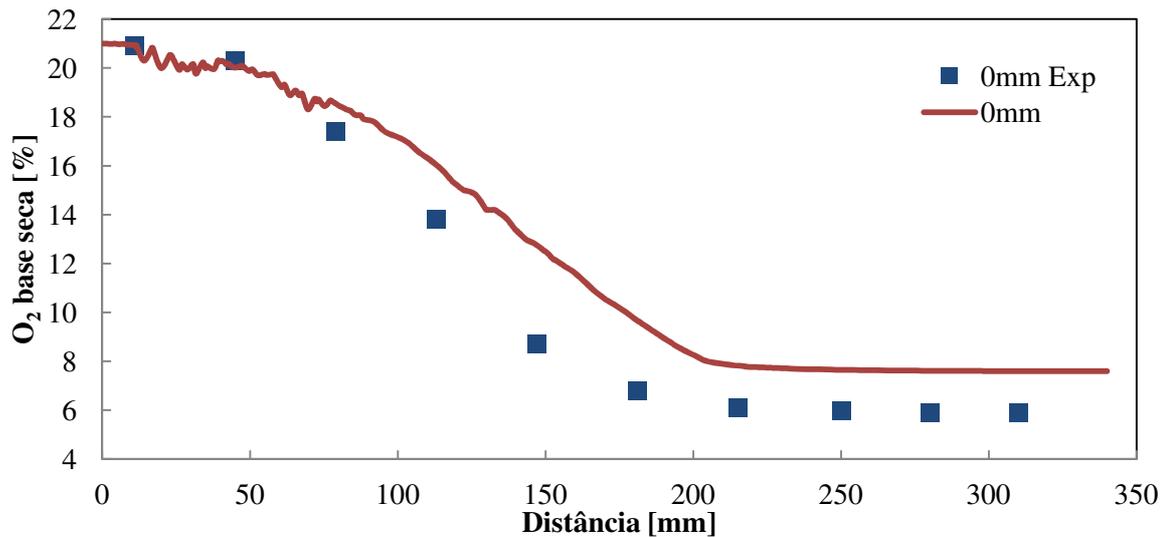


Figura 6.32 Consumo de O<sub>2</sub>, base seca, para KES/EDC1step/DO ao longo do eixo central.

Em termos da formação de CO<sub>2</sub>, a distribuição em base seca no eixo central do queimador pode ser visualizado na Figura 6.33, mostrando boa concordância com os dados experimentais.

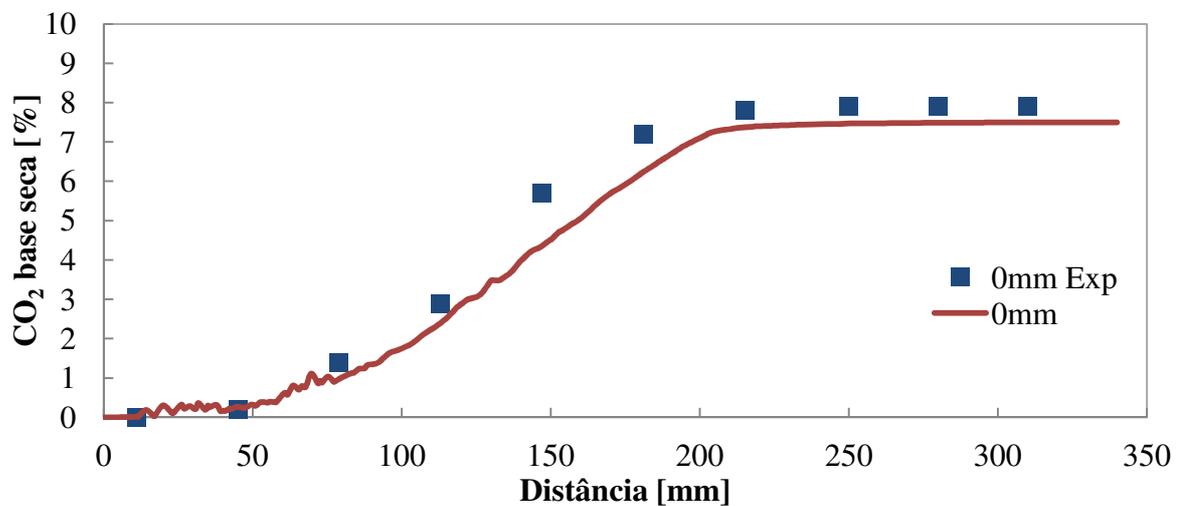


Figura 6.33 Formação de CO<sub>2</sub>, base seca, para KES/EDC1step/DO ao longo do eixo central.

#### 6.4.2 Simulação 2: KER/EDC1step/DO

Nos testes envolvendo a Simulação 2, foi empregado o modelo de turbulência *k-ε Realizable*, denominado KER, com mecanismo global de *1-step*, afim de investigar o comportamento geral da temperatura e das condições de contorno atribuídas, apesar da ausência de resultados para modelagem de CO. Na modelagem numérica com *1-step* não são

conhecidos os resultados de nenhuma espécie química intermediária.

De acordo com a Figura 6.34, a simulação com KER e uma etapa de reação teve melhor concordância com os dados experimentais que o modelo de turbulência KES, sobretudo se considerar uma temperatura máxima ligeiramente menor ao longo do eixo central. Contudo, na região de 45 mm a 181 mm, os resultados numéricos para KER ainda apresentaram um desvio relativo médio de 31,2 %, em parte pela forte turbulência do local, provocada pelo retorno do escoamento à região de injeção. Com relação a condição atribuída na parede nas simulações numéricas, foi considerada de temperatura constante, cujo valor foi de 1400 K.

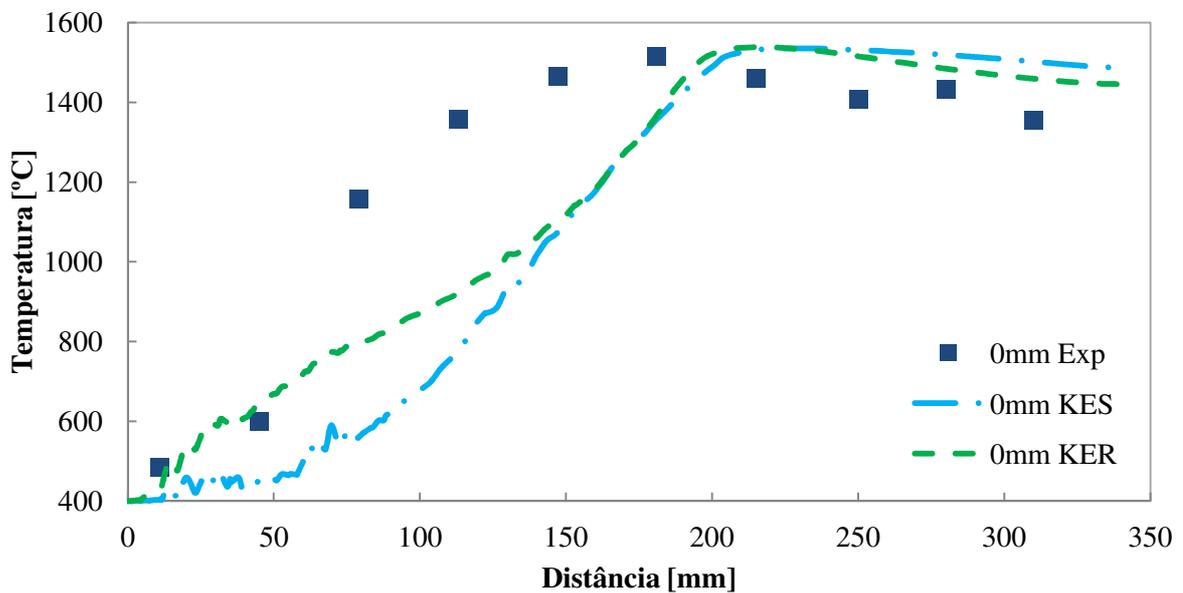


Figura 6.34 Comparação de temperatura KES *versus* KER/EDC1step/DO ao longo do eixo central.

Na Figura 6.35 são apresentados a distribuição de temperatura, o consumo de  $O_2$  e na Figura 6.36 a formação de  $CO_2$  e contorno da velocidade para a simulação KER/EDC1step/DO. Nota-se que o perfil de temperatura ficou relativamente uniforme e distribuído ao longo do plano de simetria, bem como a fração mássica de  $O_2$ , cuja disponibilidade do elemento ficou também distribuída e com valores baixos. Tais características estão presentes no regime de combustão Sem Chama Visível, conforme revisão realizada no item 2.1 desta tese.

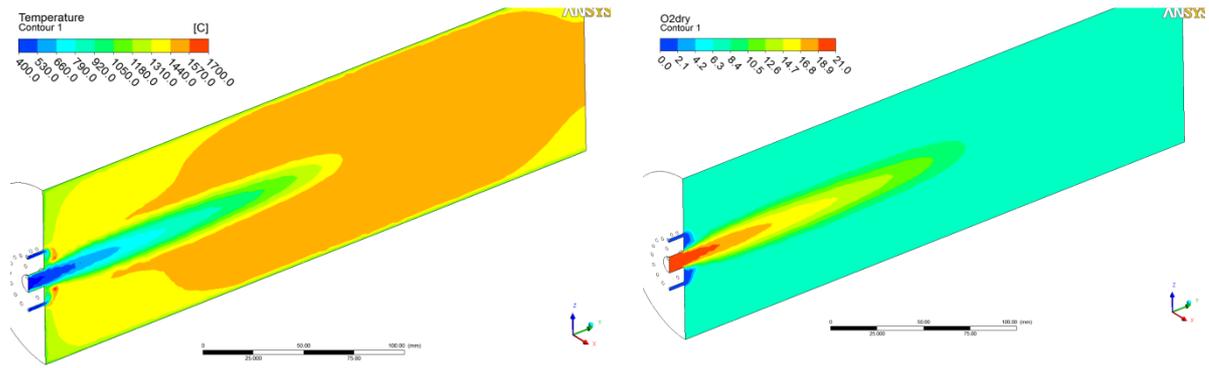


Figura 6.35 Contornos das variáveis temperatura e  $O_2$  para KER/EDC1step/DO ao longo do plano de simetria

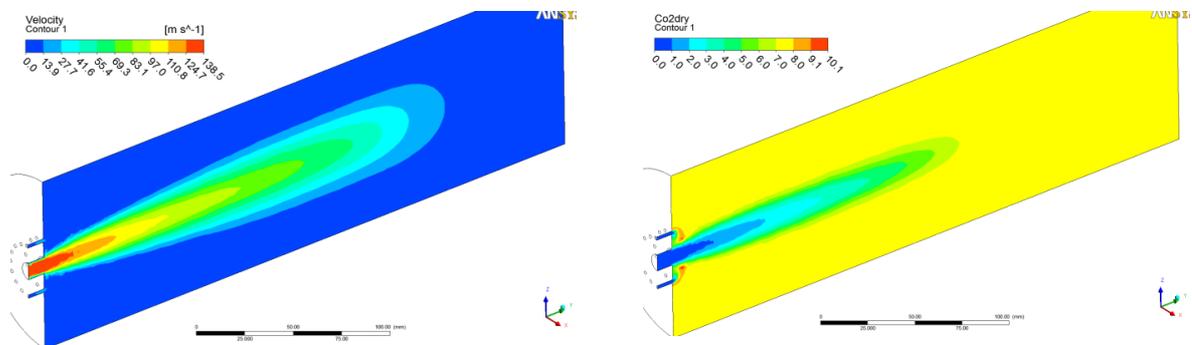


Figura 6.36 Contornos das variáveis:  $CO_2$  e velocidade para KER/EDC1step/DO ao longo do plano de simetria.

Em razão da ausência da reação de formação de  $CO$ , o contorno da distribuição do mesmo não pode ser traçada. Ainda, diante da escassa informação obtida com o modelo global de uma etapa, a modelagem de  $NO$  não foi investigada, uma vez que o valor obtido pode representar resultados incoerentes com o esperado.

Considerando a distribuição de  $O_2$  e  $CO_2$  ao longo do eixo central, mostrado na Figura 6.37 e Figura 6.38, respectivamente, nota-se que com ambos os modelos de turbulência o perfil numérico é simplificado, traduzindo apenas um comportamento geral, distanciando do perfil experimental. Contudo, dependendo do nível de detalhamento desejado, tal aproximação não acarreta problemas, considerando que é grande a rapidez de processamento envolvendo reações globais. Porém, em análises envolvendo a formação de poluentes, cinéticas mais detalhadas devem ser preferidas.

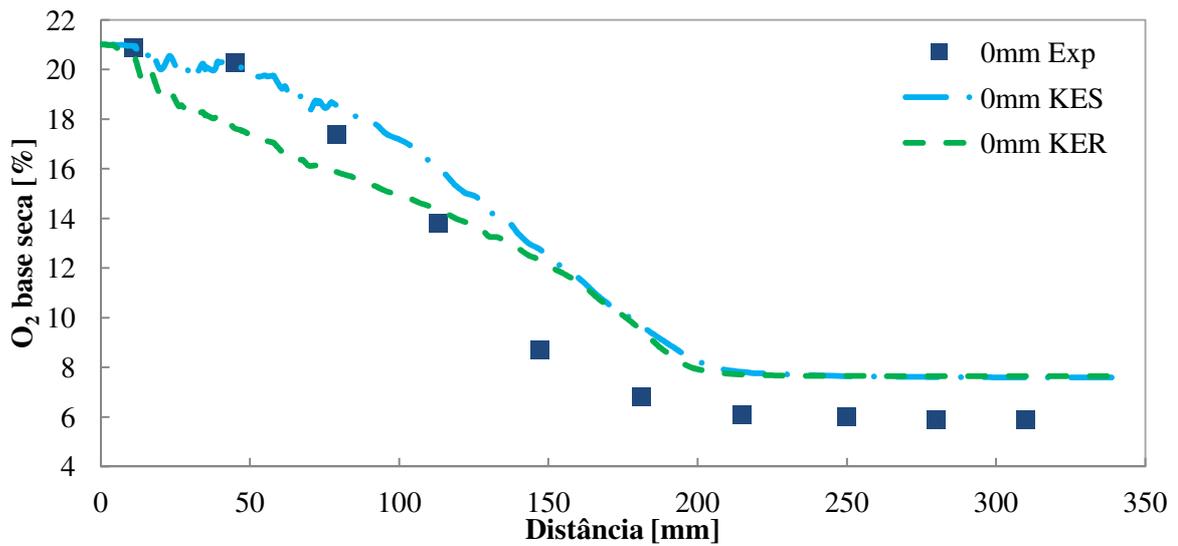


Figura 6.37 Comparação do consumo de  $O_2$  KES *versus* KER/EDC1step/DO ao longo do eixo central.

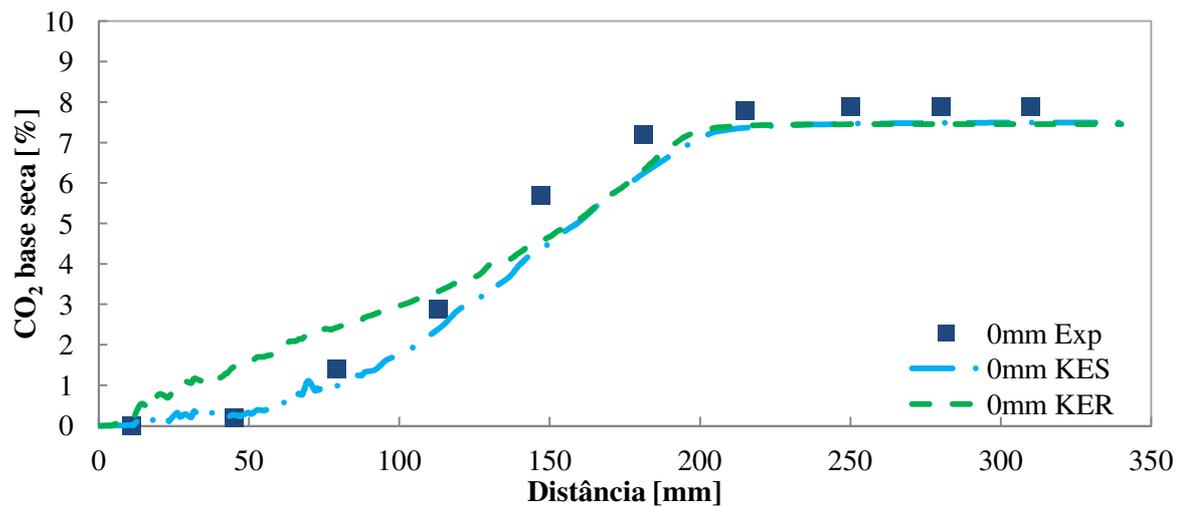


Figura 6.38 Distribuição de  $CO_2$  para o modelo de turbulência KER ao longo do eixo central.

Logo, diante da similaridade apresentada entre os modelos para o caso *1-step*, serão investigados o uso gradativo de mecanismos de reação mais detalhados, de modo a analisar o efeito deste detalhamento no perfil de temperatura, nas espécies químicas e na formação de poluentes. A seguir, serão analisados os resultados com o uso do modelo de turbulência KER, considerando que este modelo tem a característica de apresentar temperaturas mais atenuadas e distribuição uniforme de  $O_2$  e  $CO_2$  ao longo plano de simetria, como o regime de combustão Sem Chama Visível, conforme destacado na Figura 6.37 e Figura 6.38.

### 6.4.3 Simulação 3: KER/EDC\_2Step/DO

De modo a obter resultados para a formação de CO foi empregado o modelo de combustão com duas etapas, resultando na combinação KER/EDC2step/DO. Deste modo, na reação de oxidação do metano está presente em duas etapas, sendo uma corresponde a formação de CO, conforme proposto por Westbrook e Dryer (1984) e mostrado nas expressões 6.1 e 6.2 a seguir:



Tais reações estão presentes na biblioteca do ANSYS Fluent®. A seguir são apresentados o resultados relativos à distribuição de temperatura, ao consumo de O<sub>2</sub> e à formação das espécies químicas CO, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O, obtidos nesta simulação.

Conforme pode ser observado pela distribuição de temperatura ao longo do eixo central na Figura 6.39, o resultado previsto pelos modelos apresenta perfil de temperatura sem picos e com valor máximo moderado. Porém, entre 50 mm e 180 mm do bico injetor, o perfil de temperatura previsto esteve distante da tendência mostrada pelos dados experimentais, dentre outros fatores, pelo fato desta região apresentar forte recirculação, o que torna difícil qualquer previsão. Ainda, neste região, a alta velocidade de injeção do ar pode dificultar a correta previsão do perfil de temperatura pelos modelos.

Esta diferença encontrada principalmente na região entre 50 mm e 180 mm no perfil de temperatura irá refletir na formação e consumo das espécies químicas, como poderá ser observado a partir da Figura 6.40.

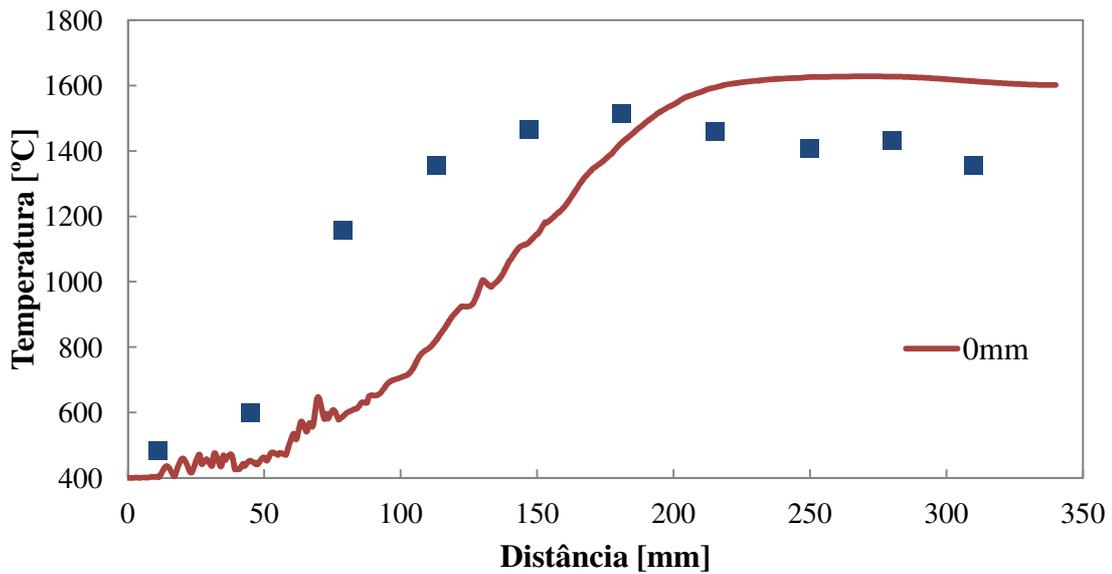


Figura 6.39 Distribuição de temperatura KER/EDC\_2Step/DO ao longo do eixo central.

Na Tabela 6.1 são mostrados os resultados obtidos durante a simulação com os modelos KER/EDC2Step/DO e o respectivo desvio para temperatura ao longo do eixo central. Os maiores desvios foram encontrados na região de forte turbulência, entre 45 mm e 147 mm.

Porém, outro fator que contribuiu para a ocorrência desta diferença é a falta de reações parciais intermediárias, visto que esta simulação envolve reação global de 2 etapas com apenas 6 elementos químicos e formando apenas  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}$ . Neste caso, mais reações intermediárias permitiriam um ajuste melhor nos resultados obtidos e menores valores de temperatura na saída do queimador, considerando que consumiriam mais energia reduzindo, consequentemente, sua temperatura máxima.

Tabela 6.1 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura para KER/EDC\_2Step/DO

Distância (mm)	Experimental (°C)	Simulação KER/EDC_2Step/DO (°C)	Desvio relativo (%)
11	484,0	403,3	16,67
45	600,5	452,4	24,67
79	1157,0	599,9	48,15
113	1356,9	844,9	37,7
147	1466,0	1117,1	23,8
181	1515,8	1422,3	6,17
215	1459,5	1595,3	9,31
250	1408,6	1625,8	15,42
280	1431,6	1627,0	13,65
310	1355,3	1613,3	19,04

Na Figura 6.40 é mostrado o consumo de  $O_2$  obtido, com o respectivo desvio relativo detalhado na Tabela 6.2. Os maiores desvios foram observados a partir de 79 mm do injetor.

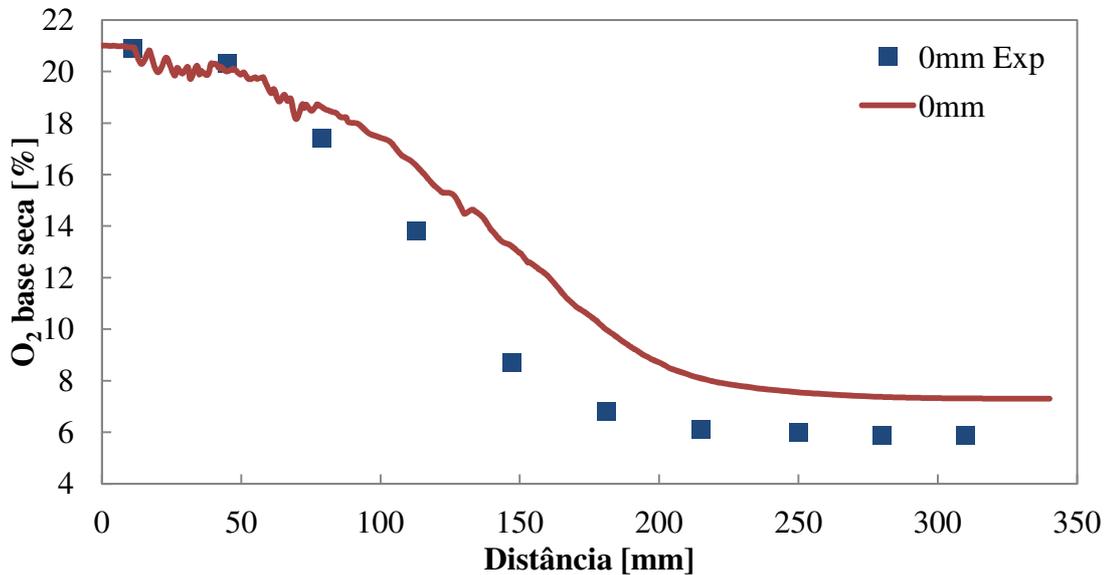


Figura 6.40 Distribuição de  $O_2$  para KER/EDC\_2Step/DO ao longo do eixo central.

A Figura 6.41 mostra o resultado da simulação para o perfil de formação de  $CO_2$  e os desvios relativos na Tabela 6.3. Nota-se que os valores numéricos tiveram boa concordância com valores experimentais, principalmente nas regiões iniciais e finais do queimador. Contudo, um desvio maior foi observado na região central, pois nesta região ocorre simultaneamente tanto o consumo completo de  $CH_4$  quanto a formação de  $CO$  e  $CO_2$ , dependendo do teor de  $O_2$  disponível e da temperatura associada. Desta forma, esta região que é complexa quimicamente, resulta em uma dificuldade na estimativa da formação de  $CO_2$ .

Tabela 6.2 Avaliação do desvio no consumo de  $O_2$  para KER/EDC\_2Step/DO

Distância (mm)	Experimental (%)	Simulação KER/EDC_2Step/DO (%)	Desvio relativo (%)
11	20,9	20,93	0,14
45	20,3	20,0	1,47
79	17,4	18,5	6,43
113	13,8	16,1	16,61
147	8,7	13,3	52,45
181	6,8	10,0	47,43
215	6,1	8,1	32,33
250	6,0	7,5	25,66
280	5,9	7,4	24,94
310	5,9	7,3	19,04

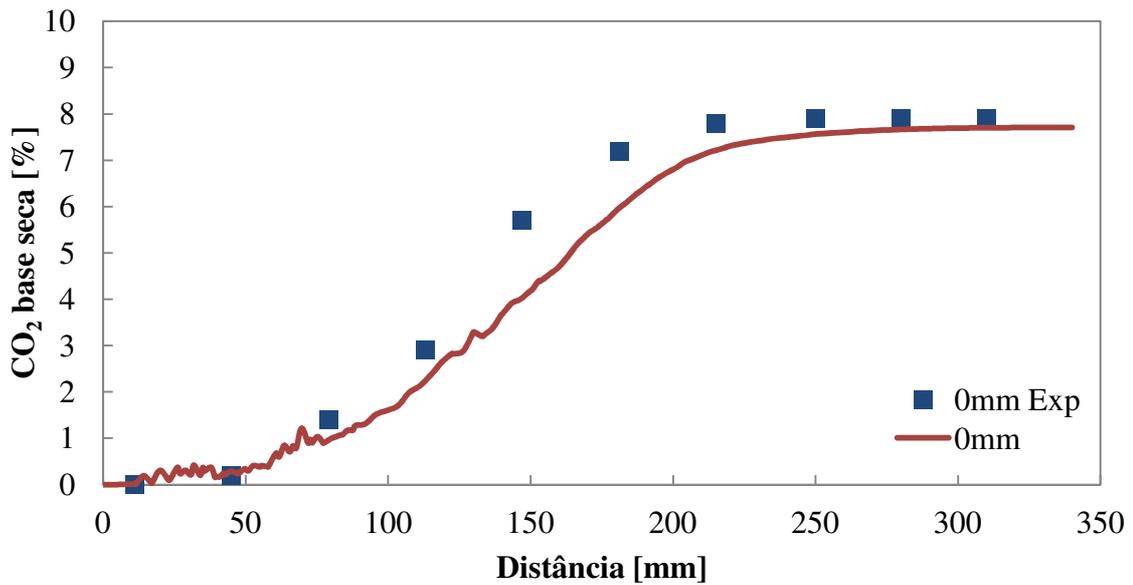


Figura 6.41 Distribuição de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_2Step/DO ao longo do eixo central.

Na Figura 6.42 tem-se a formação de CO obtida pelas simulações numéricas. Nota-se que a combinação de modelos KER/EDC\_2Step/DO não previu corretamente a distribuição de CO no centro da câmara. Diante dos diversos fatores envolvidos na formação do CO, a diferença encontrada pode ser resultado da ausência de reações parciais intermediárias, que eliminam certos elementos químicos que afetam diretamente a formação de CO. Porém, os modelos numéricos e a própria cinética química presente nas bibliotecas do ANSYS Fluent® foram inicialmente concebidas e avaliadas em regime de combustão convencionais, que são diferentes do regime de combustão Sem Chama Visível por inúmeros fatores já mencionados anteriormente, principalmente pela forte recirculação e baixo teor de O<sub>2</sub> disponível na região de queima. Como exemplo, os parâmetros de Arrhenius existentes no ANSYS Fluent® para a formação de CO podem não corresponder ao ambiente presente na combustão Sem Chama Visível. Sua alteração é permitida pelo programa, porém tais valores devem anteriormente investigados por meio de ensaios experimentais.

A formação de CO em chamas convencionais torna-se significativa principalmente na combustão incompleta, diante da ausência de O<sub>2</sub>, onde o carbono dissociado do combustível combine com uma menor quantidade de oxigênio, formando CO.

Tabela 6.3 Avaliação do desvio na formação de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_2Step/DO

Distância (mm)	Experimental (%)	Simulação KER/EDC_2Step/DO (%)	Desvio relativo (%)
11	0,0	0,02	-
45	0,2	0,29	44,41
79	1,4	1,01	27,94
113	2,9	2,37	18,33
147	5,7	4,17	29,76
181	7,2	6,09	17,50
215	7,8	7,23	7,32
250	7,9	7,57	7,20
280	7,9	7,67	2,95
310	7,9	7,7	2,53

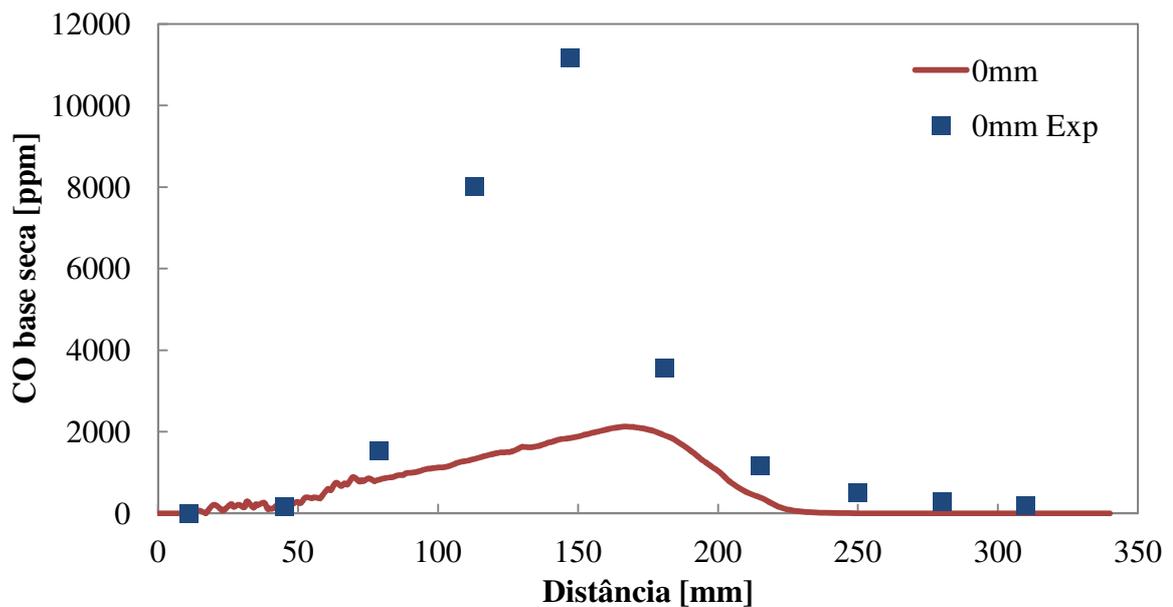


Figura 6.42 Distribuição de CO para KER/EDC\_2Step/DO ao longo do eixo central.

De acordo com a Tabela 6.4, nota-se uma grande diferença entre os resultados obtidos, apesar da curva numérica mostrar uma tendência. Novamente, a previsão inadequada dos valores de CO é resultado da ausência de espécies e reações intermediárias que compõem diretamente o CO.

Tabela 6.4 Avaliação do desvio na formação de CO para KER/EDC\_2Step/DO

Distância (mm)	Experimental (ppm)	Simulação KER/EDC_2Step/DO (ppm)	Desvio relativo (%)
11	6	3,59	40,17
45	172	238,73	38,80
79	1540	855,70	44,44
113	8007	1374,33	82,84
147	11171	1840,30	83,53
181	3572	1925,84	46,09
215	1181	367,11	68,92
250	515	3,82	99,26
280	291	0,35	99,88
310	182	0,01	100,00

Na Figura 6.43 é apresentado a formação de NO<sub>x</sub>, no caso, considerando as espécies NO e N<sub>2</sub>O. Verifica-se uma grande diferença nos resultados numéricos obtidos com os modelos já mencionados (KER/EDC2Step/DO), conforme também revelada pelos desvios mostrados na Tabela 6.5, principalmente em razão das elevadas temperaturas obtidas numericamente próximas ao injetor. Os desvios observados na Tabela 6.5 são reflexo da dificuldade na modelagem deste poluente, principalmente empregando cinética de 2-step.

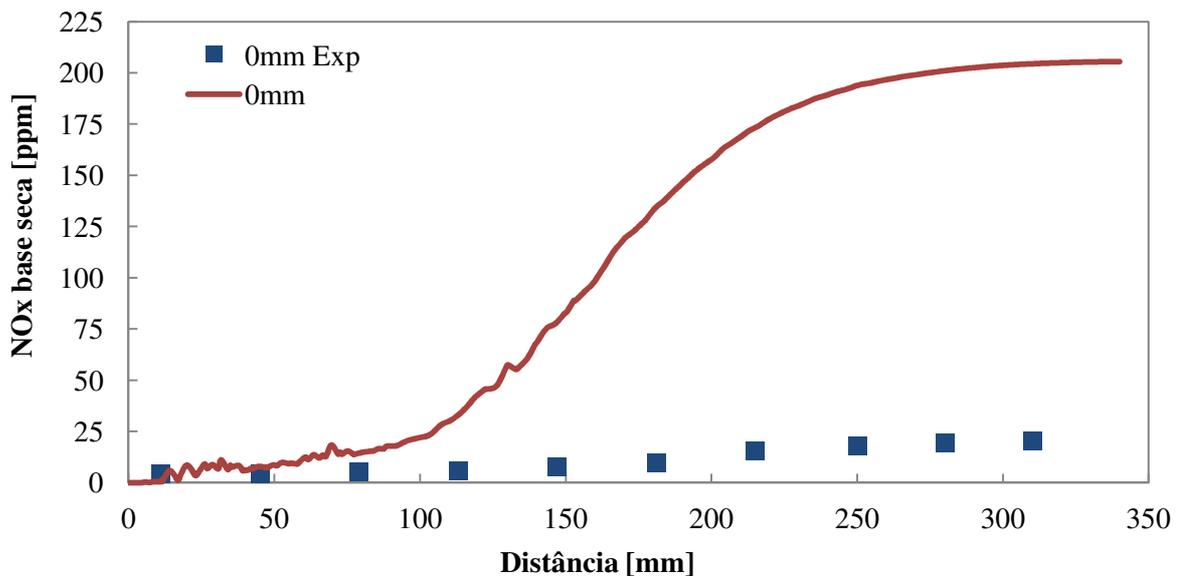
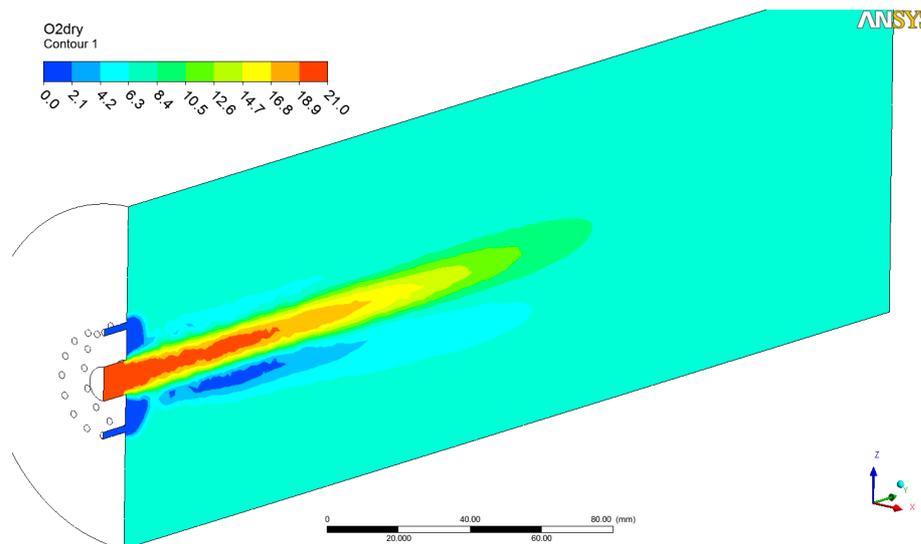
Figura 6.43 Distribuição de NO<sub>x</sub> para KER/EDC\_2Step/DO ao longo do eixo central.

Tabela 6.5 Avaliação do desvio na formação de NO para KER/EDC\_2Step/DO

Distância (mm)	Experimental (ppm)	Simulação KER/EDC_2Step/DO (ppm)	Desvio relativo (%)
11	4,26	3,2	24,88
45	4,26	7,98	87,24
79	5,55	14,85	167,56
113	5,94	35,44	496,64
147	7,68	77,67	911,27
181	9,82	133,73	1261,85
215	15,67	173,89	1009,72
250	17,91	194,05	983,48
280	19,69	201,2	921,83
310	20,35	204,36	904,23

De modo a melhor apresentar o resultado obtido com a simulação de KER/EDC\_2Step/DO, foram traçados contornos das variáveis anteriormente apresentadas, ao longo do plano de simetria definido.

Na Figura 6.44, tem-se a distribuição de  $O_2$  no plano de simetria. Nota-se a presença do forte jato de ar na injeção, atingindo em torno da metade da câmara. Também, em razão da turbulência criada pelo jato, o teor de  $O_2$  é homogêneo e reduzido ao longo do queimador.

Figura 6.44 Contorno de  $O_2$  para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria.

Na Figura 6.45 é apresentado o contorno de  $CO_2$  no plano de simetria. Pode-se observar a formação do mesmo a medida que ocorre o consumo de  $O_2$ . Também, nota-se uma ligeira assimetria, tanto na Figura 6.44 quanto na Figura 6.45, localizada abaixo do eixo central,

resultado conjunto do complexo escoamento na região sob forte recirculação, além do uso de propriedades variáveis do fluido no ANSYS Fluent®, em termos de calor específico, viscosidade, condutividade térmica através de polinômios, que podem resultar neste cenário.

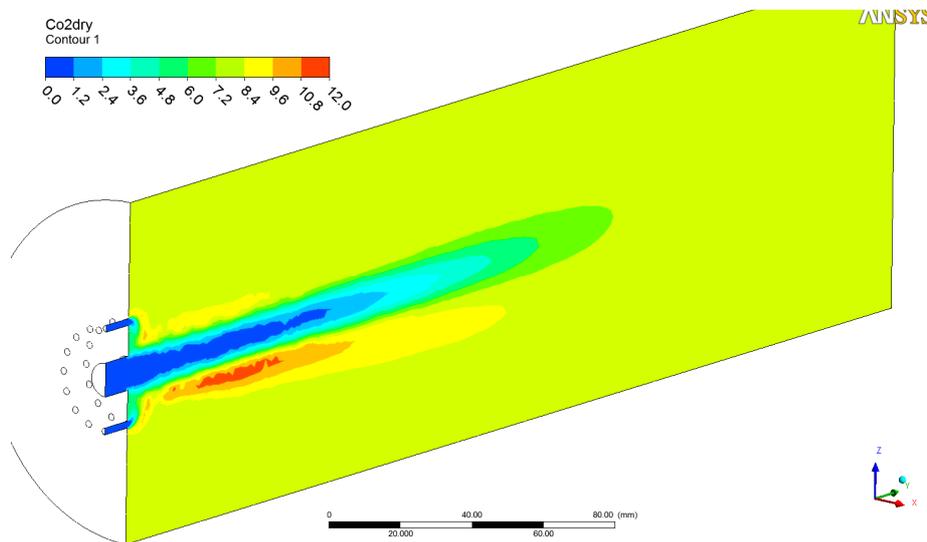


Figura 6.45 Contorno de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria.

Na Figura 6.46 tem-se o contorno de NO obtido pela simulação com KER/EDC\_2Step/DO. Pode-se observar, assim como na Figura 6.43, a elevada formação deste poluente, contrariamente os resultados experimentais da combustão Sem Chama Visível.

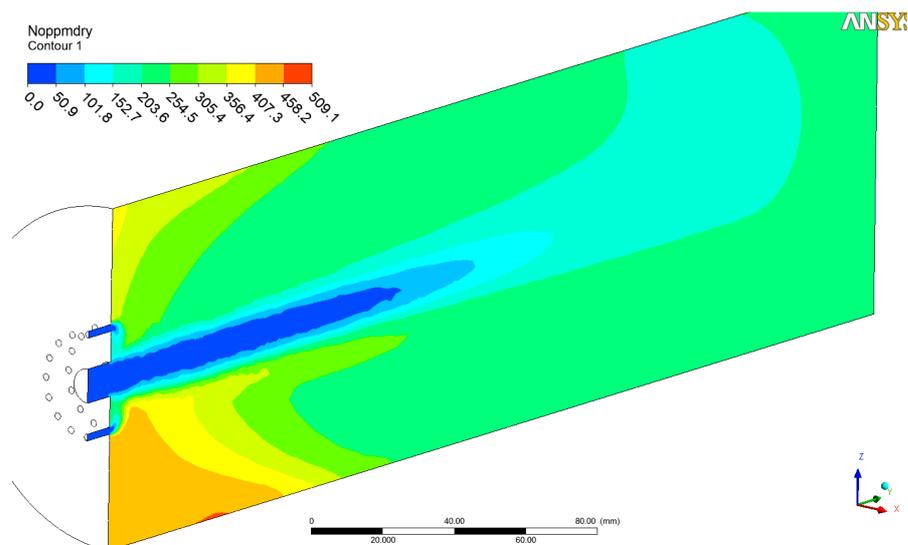


Figura 6.46 Contorno de NO para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria.

Na formação de NO<sub>x</sub>, uma grande parcela é formada via N<sub>2</sub>O, que no caso da combustão Sem Chama Visível é esperado de modo predominante. Contudo, ao longo de todo

plano de simetria apresentado na Figura 6.47, os valores continuam mínimos, neste caso em razão do uso do modelo de combustão com apenas duas etapas, que não possui espécies intermediárias para o cálculo.

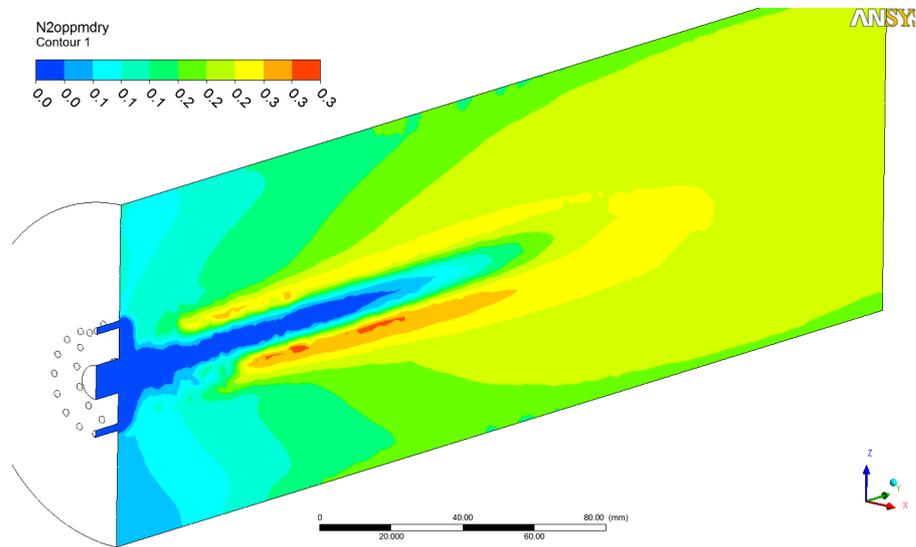


Figura 6.47 Contorno de  $N_2O$  para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria.

A Figura 6.48 apresenta o contorno do vetor velocidade, em magnitude, com perfil bem definido e forte jato de injeção do ar.

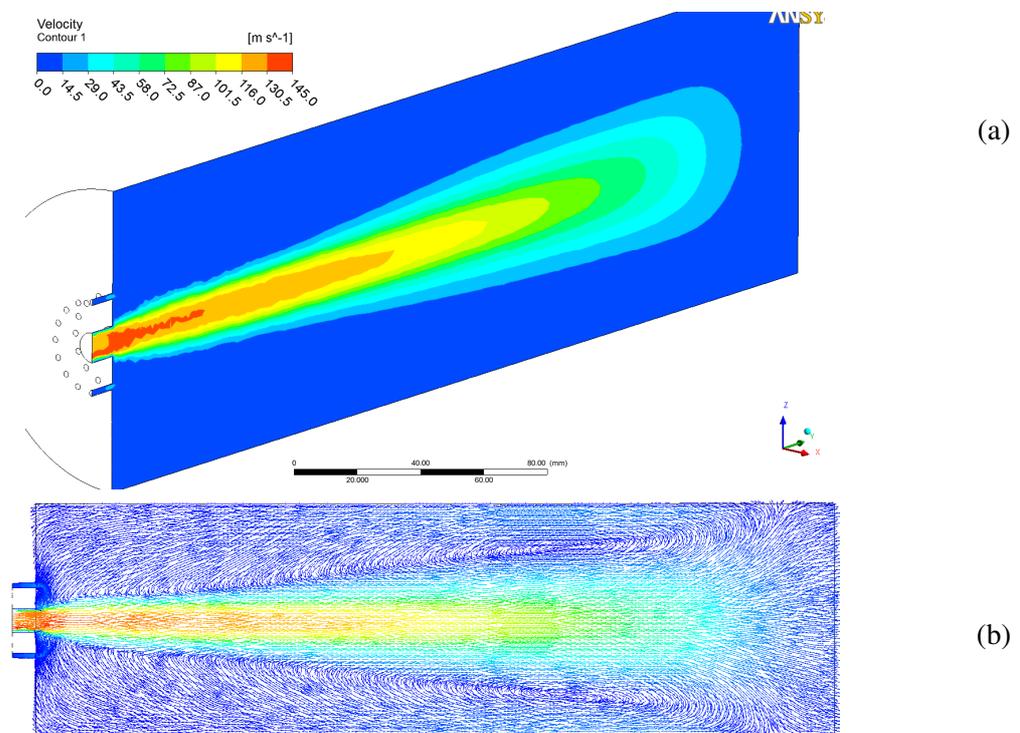


Figura 6.48 Velocidade para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria:

(a) contorno e (b) vetores velocidade

Na Figura 6.49 é detalhado o contorno da temperatura ao longo do plano de simetria. Em razão do modelo de combustão com química simplificada, em duas etapas, as temperaturas apresentaram valores elevados, com pico da ordem de 2150 °C.

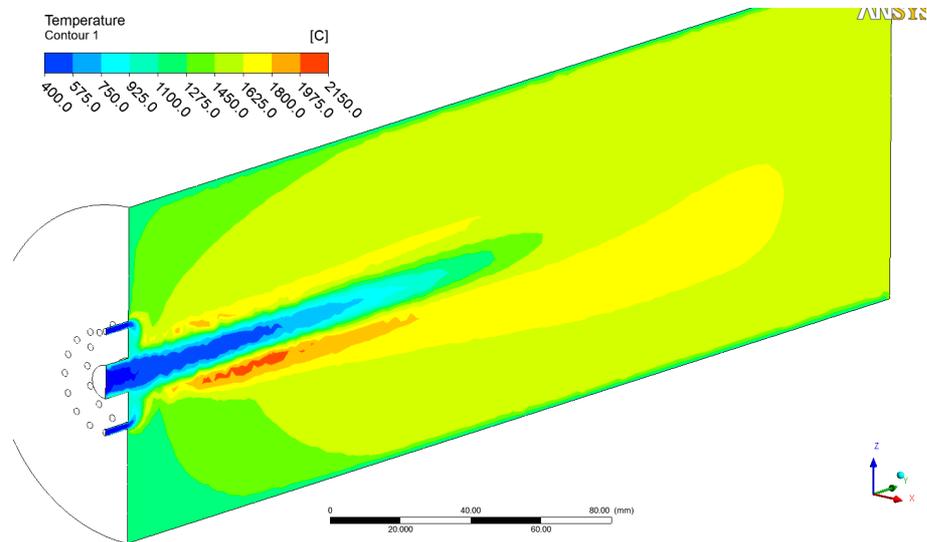


Figura 6.49 Contorno da temperatura para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria.

A Figura 6.50 apresenta o contorno da fração mássica de CO no plano de simetria. Apesar do valor encontrado ser aquém dos dados experimentais disponíveis, como já ilustrado pela Figura 6.42, a Figura 6.50 esclarece o perfil de formação do poluente. Seu comportamento tem valores maiores durante o término da oxidação do combustível e coincide com início de formação do CO<sub>2</sub>.

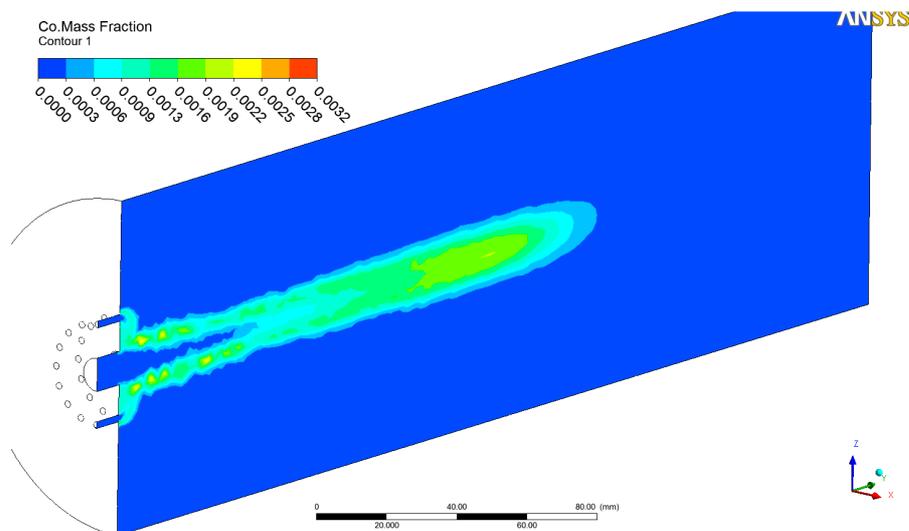


Figura 6.50 Contorno de CO para KER/EDC\_2Step/DO ao longo plano de simetria.

Uma outra forma de visualização do escoamento é através das linhas de corrente, conforme mostrado na Figura 6.51. Pode-se observar claramente a forte recirculação criada pelo jato de ar, o que confirma a presença de uma das principais características do regime de combustão Sem Chama Visível.

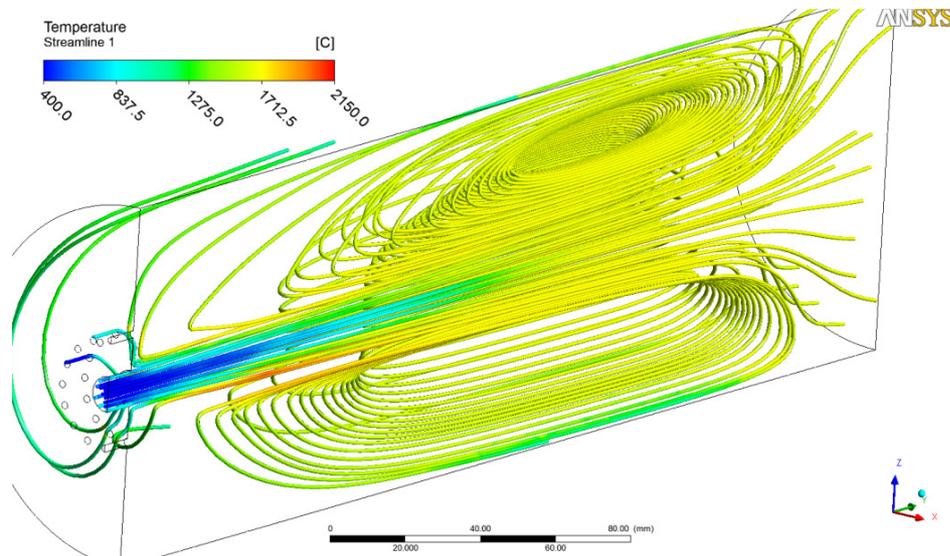


Figura 6.51 Linhas de corrente de temperatura para KER/EDC\_2Step/DO, plano de simetria.

Os perfis de temperatura, formação de  $\text{NO}_x$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , além do consumo de  $\text{O}_2$ , foram detalhados nos planos transversais criados ao longo do queimador, conforme apresentados nos gráficos mostrados na Figura 6.52 a Figura 6.56.

De acordo com a Figura 6.52, o perfil de temperatura nos planos radiais é apresentado. Nota-se sobretudo um aumento excessivo de temperatura próximo à região de injeção do ar de combustão, previsto pelo modelo numérico. Em virtude das poucas etapas de reação envolvidas no modelo *2-step*, são esperados as maiores temperaturas pela ausência de espécies intermediárias que consomem naturalmente energia do processo.

Na Figura 6.53 o perfil de consumo de  $\text{O}_2$  nos planos radiais é mostrado. Nota-se uma concordância com os resultados experimentais a partir de 181 mm do injetor, quando o consumo tende a se estabilizar. Também, foi monitorado o teor de  $\text{O}_2$  na saída como um dos critérios de convergência, de maneira a certificar que o processo de combustão foi concluído. Novamente, na região próxima ao injetor, os resultados previstos numericamente divergiram dos dados experimentais, apesar do comportamento ter sido mantido.

A formação de  $\text{CO}_2$  também foi retratada ao longo dos planos radiais traçados, na Figura 6.54. Nota-se um comportamento semelhante ao consumo de  $\text{O}_2$ , com concordância na região de saída e divergência da região de injeção do ar.

Na Figura 6.55 são apresentados os valores de CO. Pode-se constatar que tanto os valores obtidos numericamente quanto a tendência de formação não correspondem aos dados experimentais. Ainda de acordo com a Figura 6.55, a escala empregada no gráfico foi definida de modo a incorporar os resultados numéricos de todos os planos, demonstrando assim o comportamento da formação ao longo do queimador.

Existem inúmeras fontes que afetam a formação de CO durante o processo de combustão. Uma delas corresponde ao número de reações intermediárias, em ambos sentidos de reação, que contribuem para a formação do monóxido de carbono. Neste caso, a simulação envolvendo apenas duas etapas poderá fornecer resultados equivocados, cabendo às constantes de cinética química do modelo, como coeficiente da reação e energia de ativação serem investigadas para o processo de combustão específico em análise. Outro ponto a ser analisado diz respeito às constantes que representam a escala de tempo empregadas pelo modelo de combustão, que refletem o intervalo de tempo que o processo de combustão ocorrerá. Assim, considerando que a combustão Sem Chama Visível possui características bem diferentes da queima convencional, tais ajustes são necessários a fim de minimizar tais diferenças obtidas nos resultados numéricos.

Por último, na Figura 6.56, o perfil de formação de  $\text{NO}_x$  é apresentado nos planos radiais. A divergência encontrada em relação aos resultados experimentais é reflexo do perfil de temperatura obtido numericamente, uma vez que a taxa de formação deste poluente é fortemente dependente do valor de temperatura. Logo, o uso de reações intermediárias reduzirá o perfil de temperatura, refletindo em menores valores de  $\text{NO}_x$  encontrados.

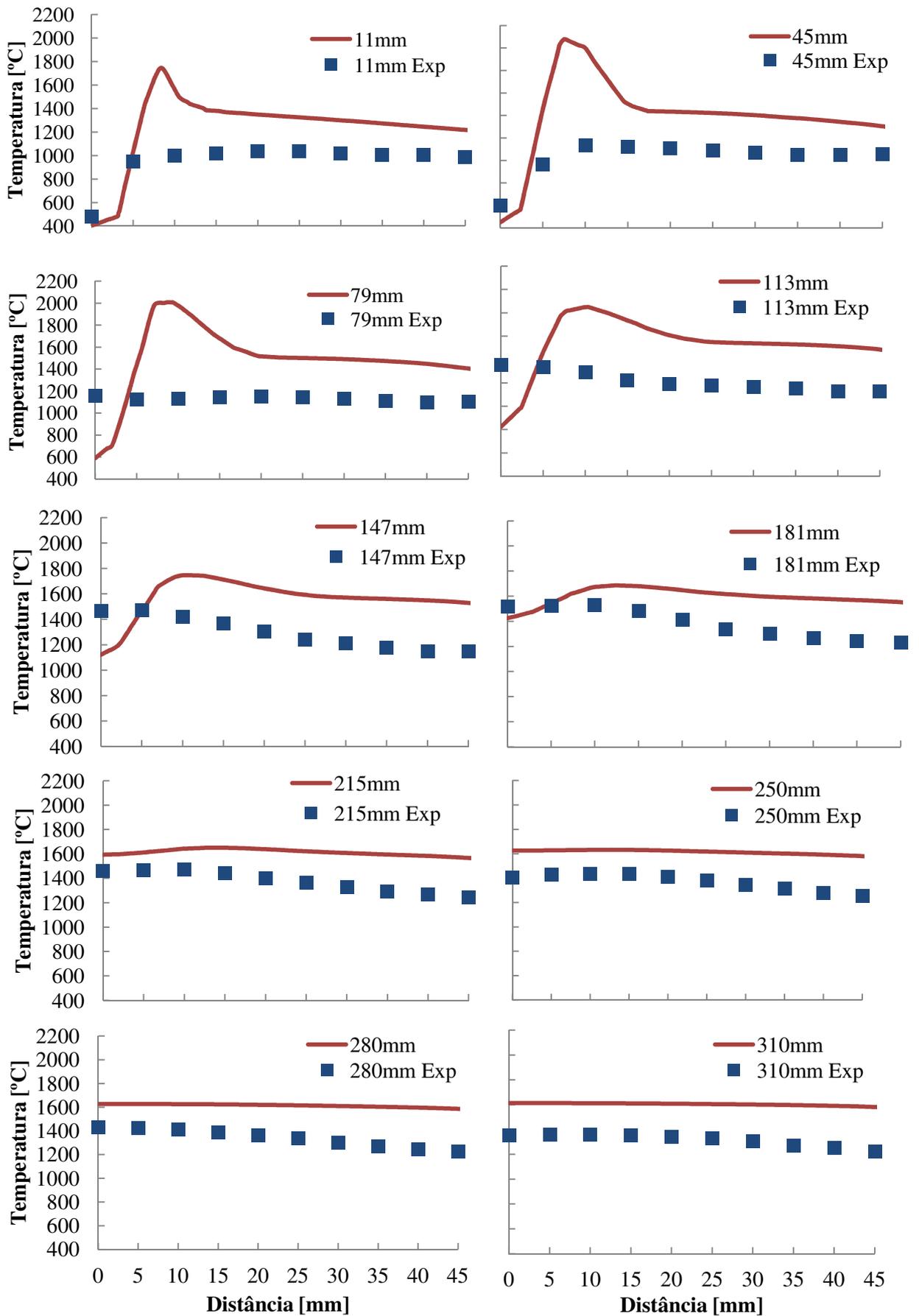


Figura 6.52 Distribuição de temperatura para KER/EDC\_2Step/DO nos planos radiais.

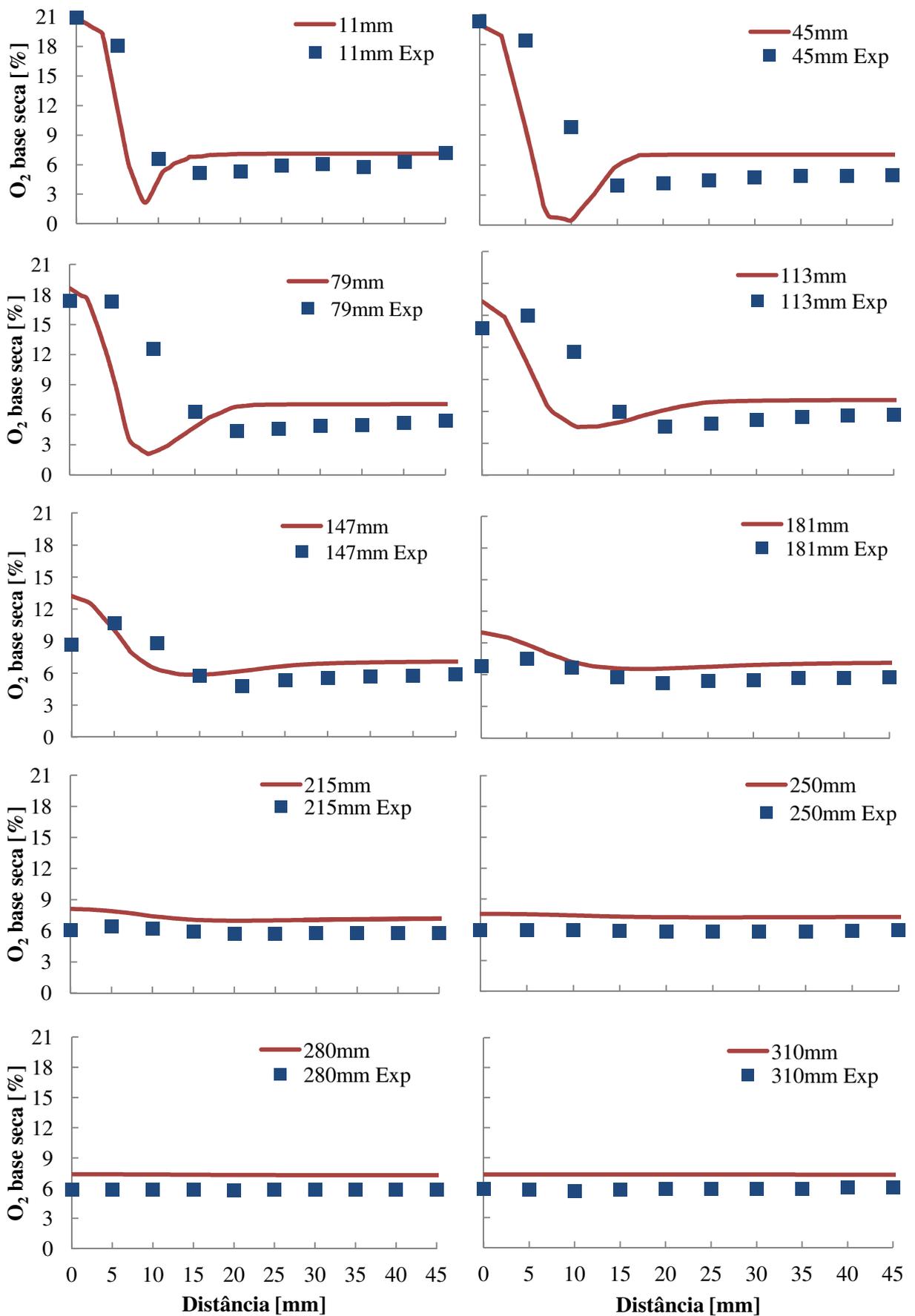


Figura 6.53 Distribuição de  $O_2$  para KER/EDC\_2Step/DO nos planos radiais.

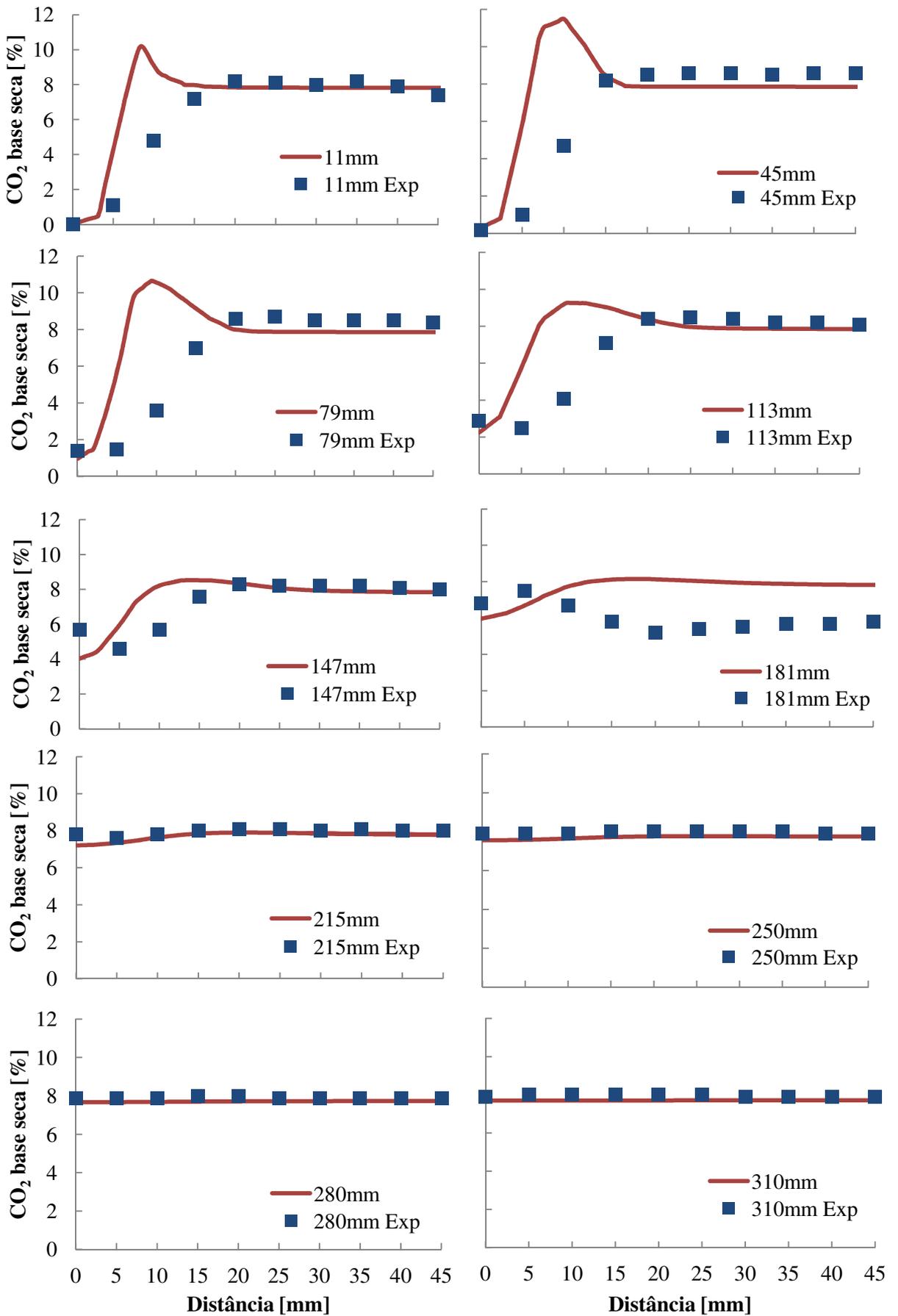


Figura 6.54 Distribuição de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_2Step/DO nos planos radiais.

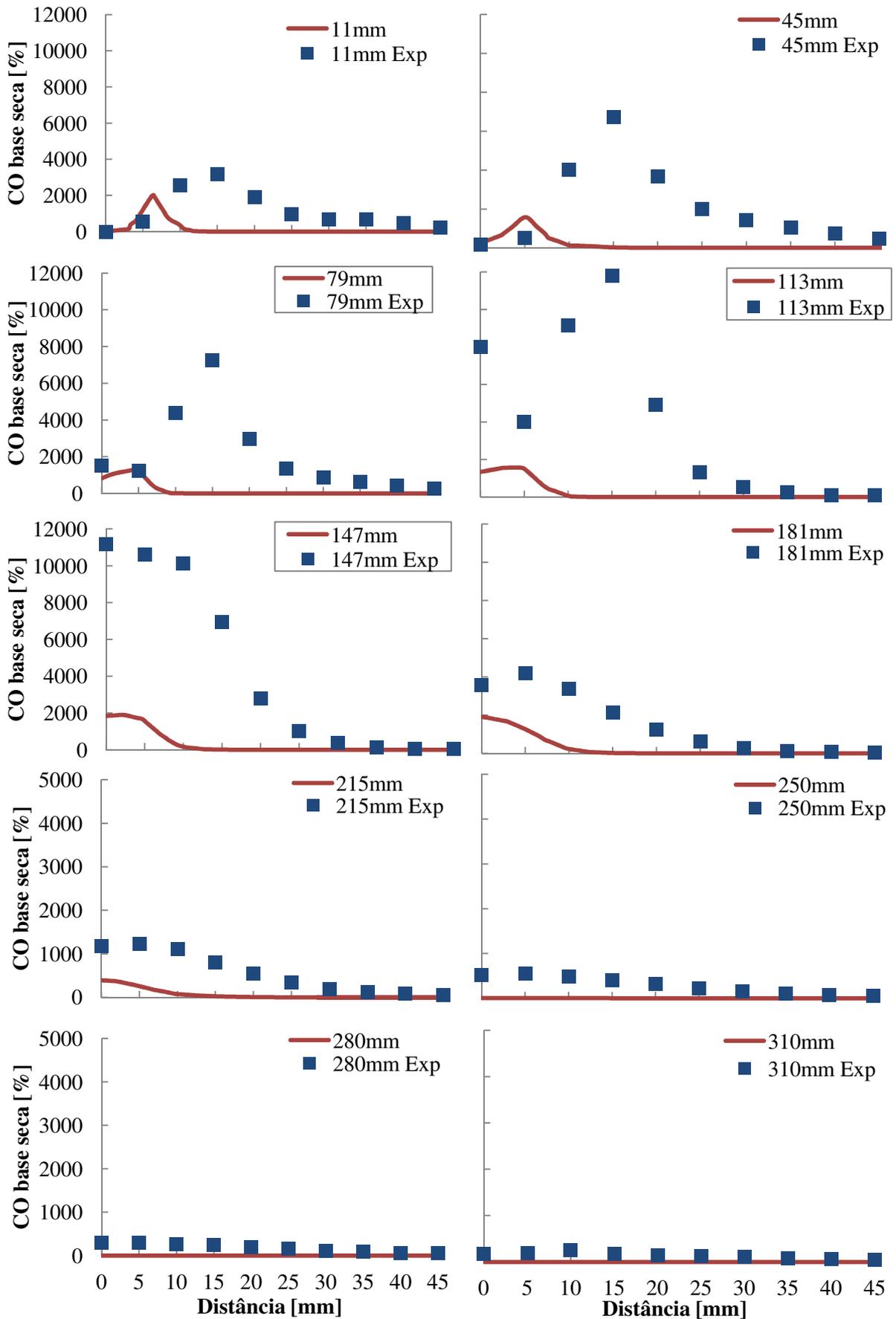


Figura 6.55 Distribuição de CO para KER/EDC\_2Step/DO nos planos radiais.

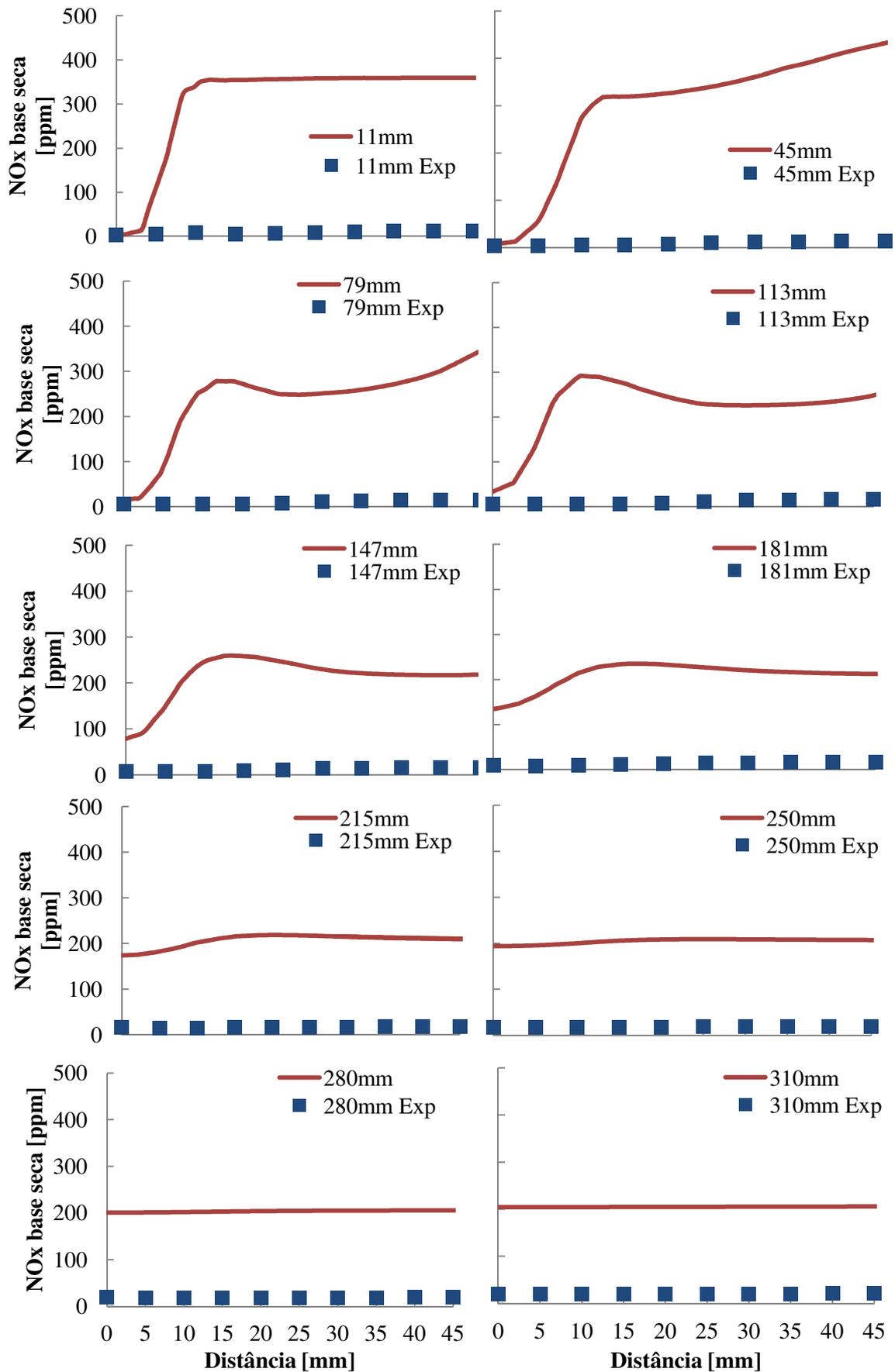


Figura 6.56 Distribuição de NOx para KER/EDC\_2Step/DO nos planos radiais.

#### 6.4.4 Simulação 4: KER/EDC\_GRIMech 3.0/DO

Esta simulação emprega o modelo de turbulência KER, modelo de combustão EDC com química detalhada pelo GRIMech3.0, além do modelo DO para a modelagem da radiação. A biblioteca de reações químicas do GRIMech3.0 corresponde a última versão criada pela *Gas Research Institute*, com objetivo de reunir e uniformizar os dados relativos a cinética química. Em particular ao GRIMech3.0, foram reunidas 325 reações intermediárias, associadas a taxa de reação e parâmetros de Arrhenius, totalizando de 53 espécies químicas diferentes (SMITH *et al.*, 2014).

Diante das inúmeras reações intermediárias presentes na modelagem com cinética detalhada, o resultado previsto tende a ser mais próximo dos dados experimentais. Considerando o campo de temperaturas, em virtudes das entalpias de formação das diversas etapas envolvidas, pois a energia disponível pelo processo de combustão tende a ser consumida, reduzindo sua temperatura global.

Contudo, em razão do regime de combustão Sem Chama Visível possuir grandes diferenças em comparação com o regime de combustão convencional, cujos parâmetros de cinética foram exaustivamente validados experimentalmente, o aparecimento de divergências poderia ocorrer. Assim, uma das principais diferenças já comentada anteriormente está no baixo teor de oxigênio disponível na zona de queima, aliado a uma combustão homogênea e distribuída sob moderadas temperaturas.

A Figura 6.57 apresenta o perfil de temperatura obtido pelas simulações com os modelos KER/EDC\_GRIMech3.0/DO. Nota-se que o comportamento numérico é semelhante àquele descrito pelos dados experimentais. A partir da metade da câmara, em 147 mm, os dados melhor se aproximaram, conforme evidenciado pelos desvios apresentados da Tabela 6.6. Os maiores desvios permanecem na região entre 45 mm e 113 mm, ou seja, na região de intensa turbulência, o que dificulta normalmente a simulação do comportamento. Por último, o perfil de temperatura mais moderado foi obtido pela simulação numérica em virtude do detalhamento cinético empregado, onde grande parcela da energia da combustão é consumida nas reações parciais e elementos químicos presentes.

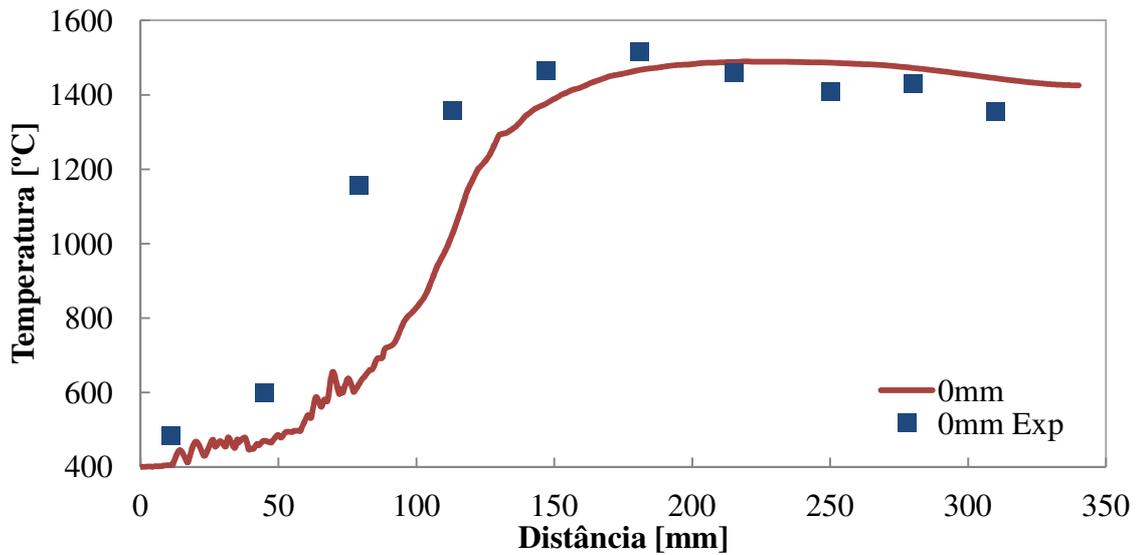


Figura 6.57 Distribuição de temperatura para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no eixo central.

Tabela 6.6 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura para KER/EDC\_GRIMech/DO

Distância (mm)	Experimental (%)	Simulação KER/EDC_GRIMech/DO (%)	Desvio relativo (%)
11	484,0	412,1	16,34
45	600,5	470,2	21,70
79	1157,0	636,3	45,00
113	1356,9	1066,6	21,40
147	1466,0	1374,6	6,24
181	1515,8	1466,3	3,26
215	1459,5	1488,6	1,99
250	1408,6	1486,4	5,52
280	1431,6	1471,3	2,77
310	1355,3	1445,2	6,63

Na Figura 6.58 é apresentado o consumo de  $O_2$  ao longo do eixo central, considerando química detalhada. Verifica-se que os resultados numéricos ajustaram melhor aos dados experimentais, principalmente no comportamento e formato do perfil. Até 147 mm do injetor, os resultados numéricos apresentaram desvios pequenos, conforme pode-se verificar na Tabela 6.7, cujo valor máximo foi de 9,68 %. A partir de 181 mm os desvios aumentaram, permanecendo em torno de 28,0 %, em situação semelhante à simulação anterior (KER/EDC\_2Step/DO) mostrada na Figura 6.40.

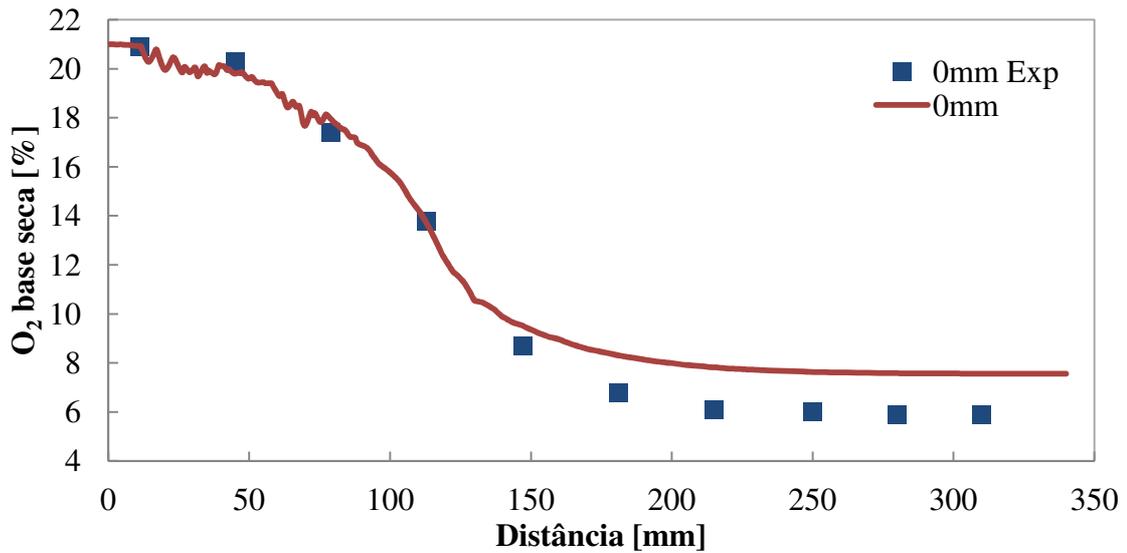


Figura 6.58 Consumo de O<sub>2</sub> para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no eixo central.

Tabela 6.7 Avaliação do desvio no consumo de O<sub>2</sub> para KER/EDC\_GRIMech/DO

Distância (mm)	Experimental (%)	Simulação KER/EDC_GRIMech3.0/DO (%)	Desvio relativo (%)
11	20,9	20,92	0,10
45	20,3	19,8	2,43
79	17,4	17,8	2,24
113	13,8	13,3	3,89
147	8,7	9,5	9,68
181	6,8	8,3	22,29
215	6,1	7,8	28,07
250	6,0	7,6	27,11
280	5,9	7,6	28,42
310	5,9	7,6	28,17

O perfil de formação de CO<sub>2</sub> obtido pelos modelos KER/EDC\_GRIMech3.0/DO está mostrado na Figura 6.59. Pode-se observar uma boa concordância dos dados numéricos com os experimentais, apesar do desvio, a 45 mm e 79 mm do injetor, ter sido superior aos valores obtidos na simulação anterior (KER/EDC\_2Step/DO), como mostrado na Tabela 6.8. Nota-se que o perfil é semelhante aquele traçado pelos dados experimentais. Nos demais pontos, o desvio esteve menor a 113 mm, 181 mm e em especial a 147 mm do injetor, onde o desvio passou de 29,76 % na simulação anterior para 8,14 %. Vale ressaltar que apenas observando a Figura 6.59, não se pode identificar claramente os maiores desvios na região próxima do injetor, apresentados na Tabela 6.8, em virtude da escala empregada no gráfico.

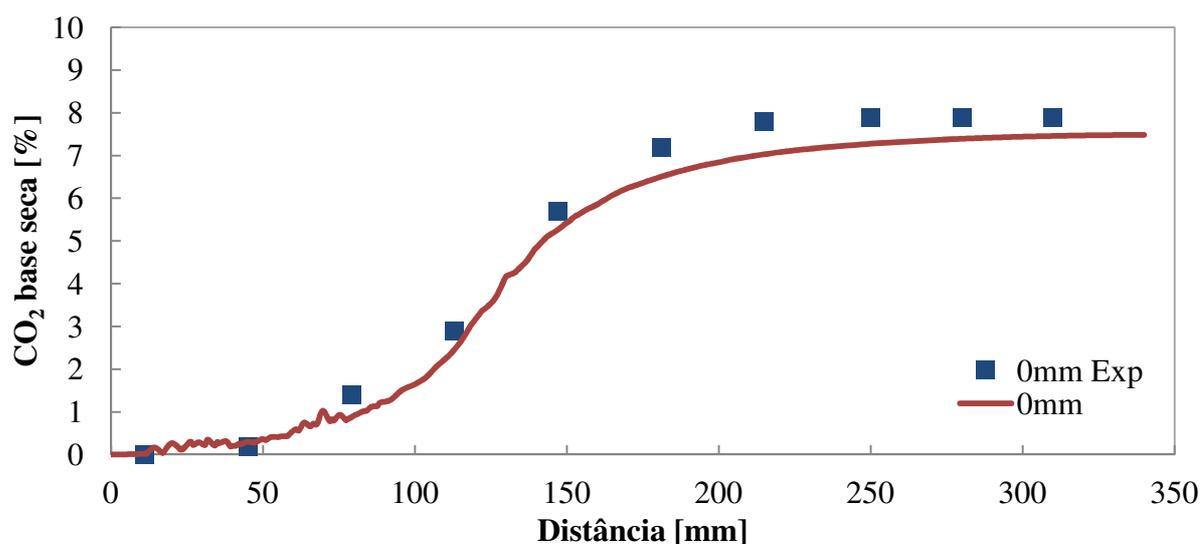


Figura 6.59 Formação de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no eixo central.

Tabela 6.8 Avaliação do desvio na formação de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO

Distância (mm)	Experimental (%)	Simulação KER/EDC_GRIMech3.0/DO (%)	Desvio relativo (%)
11	0,0	0,0	-
45	0,2	0,3	50,00
79	1,4	0,9	33,96
113	2,9	2,6	9,12
147	5,7	5,2	8,14
181	7,2	6,5	9,79
215	7,8	7,0	9,77
250	7,9	7,3	7,8
280	7,9	7,4	6,35
310	7,9	7,5	5,58

Na Figura 6.60 os resultados numéricos para a formação de CO ao longo eixo central empregando a cinética detalhada GRIMech3.0 é mostrada. Verifica-se que o perfil numérico tem semelhança com aquele traçado pelos dados experimentais, apesar dos valores numéricos serem superiores. Este cenário pode ser visualizado pelos desvios mostrados na Tabela 6.9. Em virtude da escala necessária para apresentar o pico de CO obtido numericamente, novamente torna-se difícil observar claramente os desvios na região próxima do injetor apenas utilizando a Figura 6.60, o que reforça a importância do uso de tabelas para análises dos resultados.

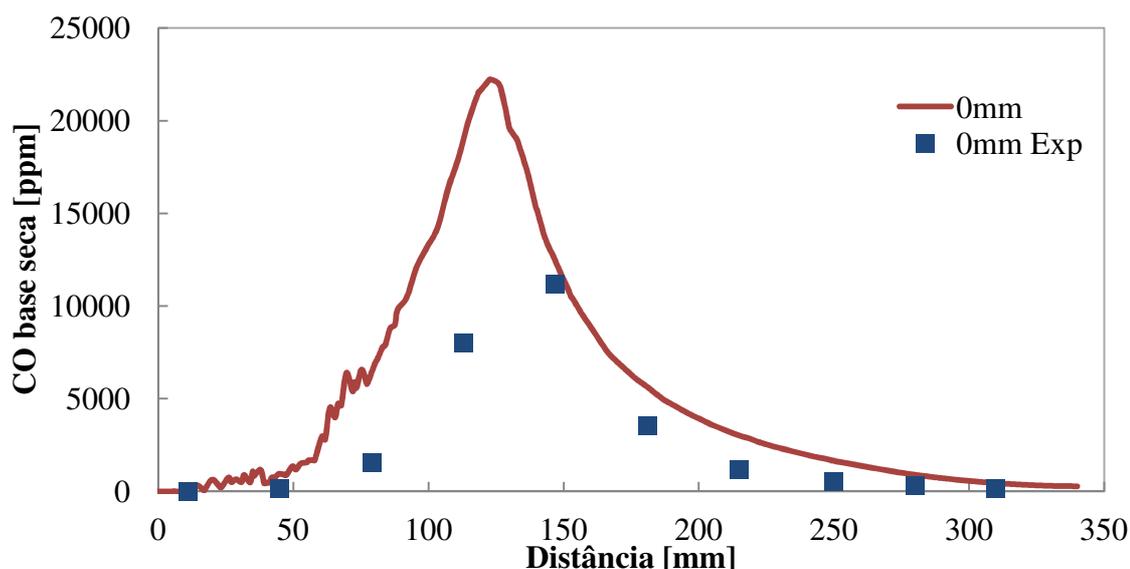


Figura 6.60 Formação de CO para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no eixo central.

Tabela 6.9 Avaliação do desvio na formação de CO para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO

Distância (mm)	Experimental (ppm)	Simulação KER/EDC_GRIMech3.0 (ppm)	Desvio relativo (%)
11	60	66,5	10,08
45	172	949,4	451,96
79	1540	6967,7	352,44
113	8007	20072,1	150,68
147	11171	12587,1	12,68
181	3572	568,6	59,06
215	1181	2977,8	152,14
250	515	1636,5	217,76
280	291	875,8	200,98
310	182	458,8	152,08

Na Figura 6.61 é apresentada a formação de  $\text{NO}_x$  ao longo do plano central, obtida através da combustão com química detalhada, GRIMech3.0. Pode-se observar que os valores obtidos são menores que a simulação anterior com *2-step*, cujo valor máximo foi 200 ppm, enquanto que com química detalhada (GRIMech3.0) o valor não ultrapassou 50 ppm. Isto se deve as diversas espécies presentes, sobretudo que afetam diretamente a formação de  $\text{NO}_x$ , tais como  $\text{NO}$ ,  $\text{N}_2\text{O}$  e  $\text{NO}_2$ . Além disso, em virtude do campo de temperaturas mais ameno, os valores de  $\text{NO}_x$  esperados deveriam ser menores.

Os desvios ainda presentes, mesmo com química detalhada, se devem ao método empregado na modelagem da turbulência, que neste trabalho foi RANS. Conforme discutido anteriormente, as variáveis de escoamento são consideradas médias neste caso, o que leva a

estimativas, por vezes distorcidas, das flutuações realmente presentes. Neste caso, como o teor de  $\text{NO}_x$  formado é muito pequeno, sobretudo no regime de combustão Sem Chama Visível, tais flutuações assumem papel relevante no valor final obtido. Com base nesta análise, valores mais próximos poderão ser obtidos na modelagem do tipo LES ou DNS, apesar do excessivo tempo computacional exigido. Assim, é necessário analisar o nível de precisão de interesse, uma vez que no método RANS e química detalhada com GRIMech3.0, este resultado foi obtido após cerca de 380 horas. Na Tabela 6.10 os desvios para a formação de NO via GRIMech3.0 são apresentados.

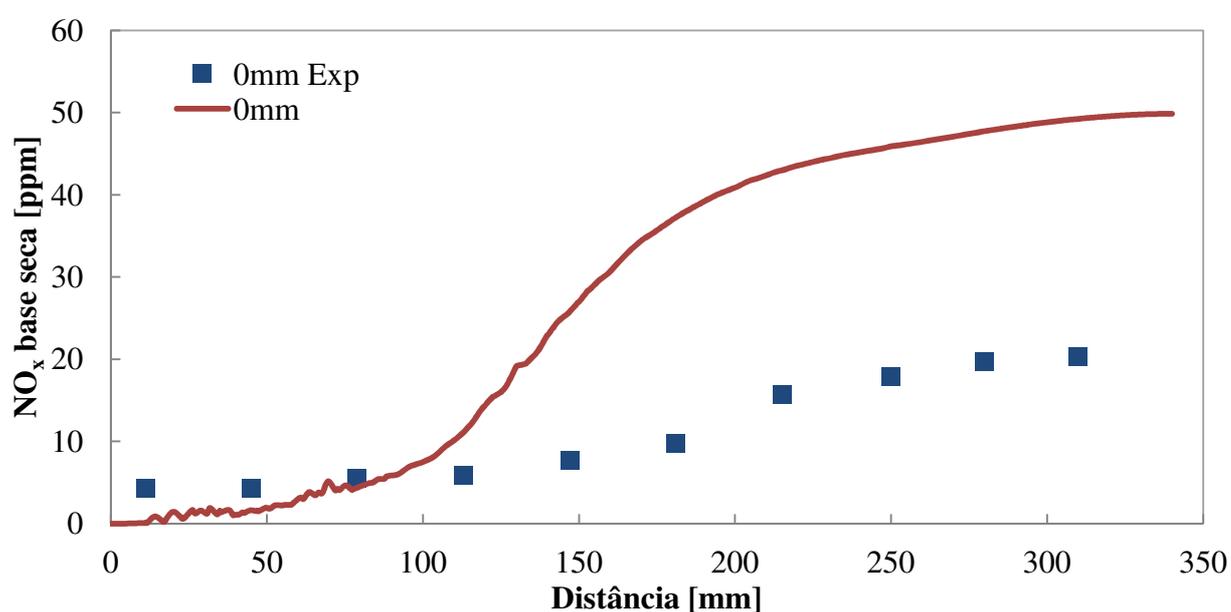


Figura 6.61 Formação de  $\text{NO}_x$  para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no eixo central.

Tabela 6.10 Avaliação do desvio na formação de NO para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO

Distância (mm)	Experimental (ppm)	Simulação KER/EDC_GRIMech3.0/DO (ppm)	Desvio relativo (%)
11	4,26	0,1	98,10
45	4,26	1,6	62,21
79	5,55	4,6	17,18
113	5,94	11,9	100,38
147	7,68	25,6	233,04
181	9,82	37,1	277,98
213	15,67	43,1	174,82
250	17,91	45,9	156,41
280	19,69	47,8	142,81
310	20,35	49,2	141,83

Na Figura 6.62, o contorno do consumo de  $O_2$  foi traçado ao longo do plano de simetria. Pode-se observar que o comportamento foi semelhante à simulação com 2-step, apenas com pequenas variações no teor de oxigênio na região de injeção. Também, o perfil de formação de  $CO_2$  não teve grandes mudanças, como mostrado na Figura 6.63.

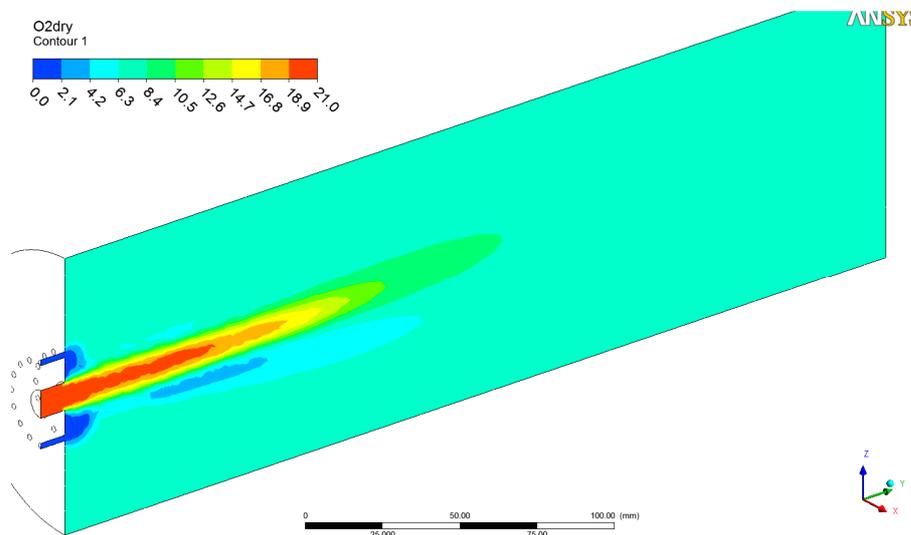


Figura 6.62 Contorno de  $O_2$  para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.

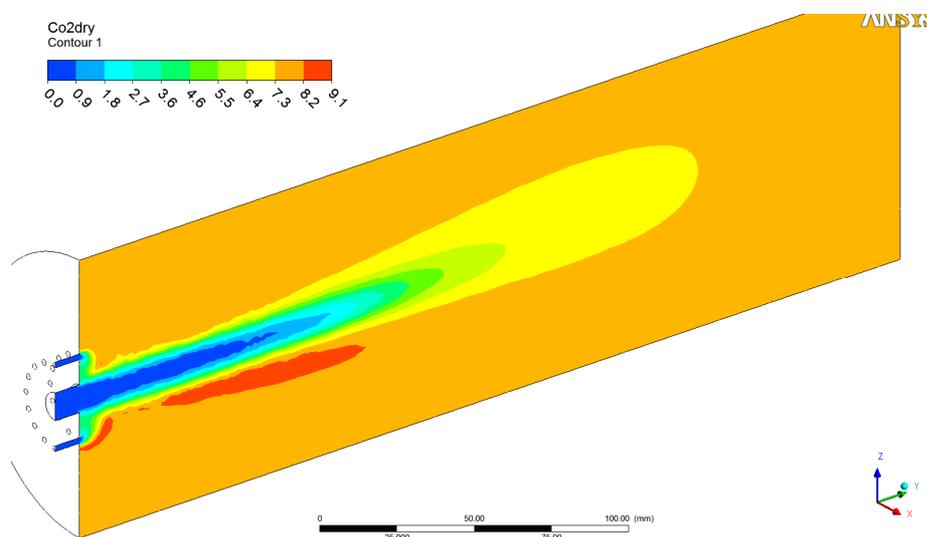


Figura 6.63 Contorno de  $CO_2$  para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.

A Figura 6.64 mostra o contorno de NO com química detalhada (GRIMech 3.0). Como discutido anteriormente, os valores máximos obtidos estiveram menores que a simulação 2-step. Contudo, observando a Figura 6.67, nota-se que a maior parcela de NO mostrada na Figura 6.64 acompanha a região de maior temperatura, situada abaixo do eixo central, como esperado.

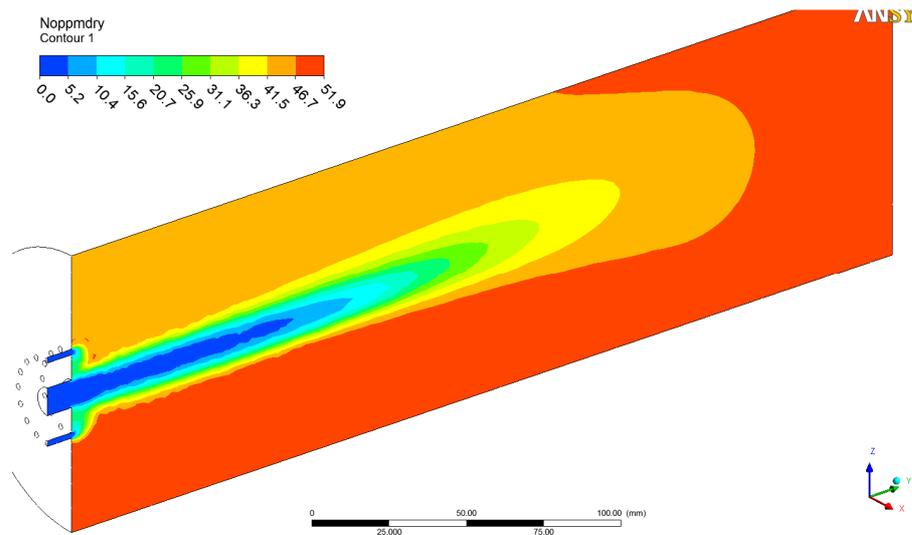


Figura 6.64 Contorno de NO para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.

Quanto a formação do  $N_2O$ , mostrada na Figura 6.65, a maior parcela encontra-se no eixo central próximo à metade do queimador. Nota-se ainda uma simetria no perfil bem definida

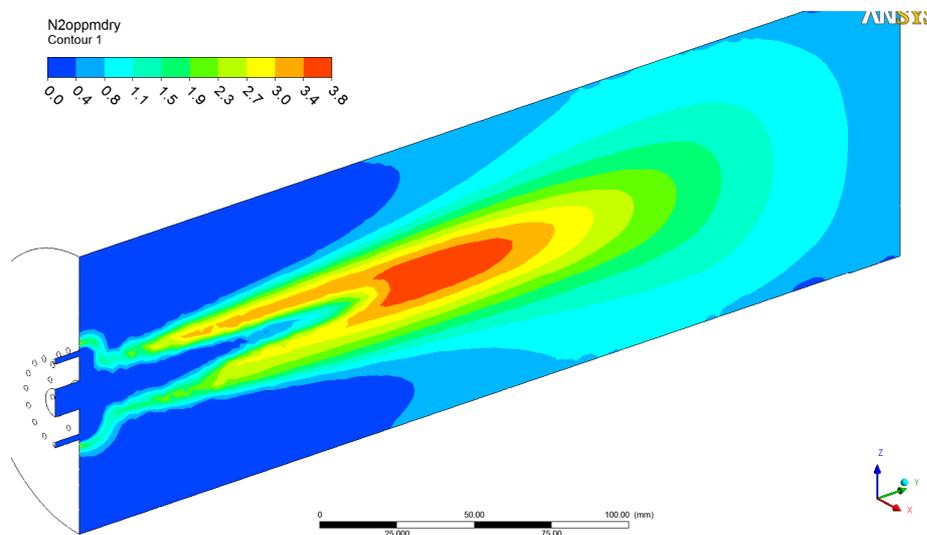


Figura 6.65 Contorno de  $N_2O$  para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.

Na Figura 6.66 mostra o contorno da velocidade, em magnitude, ao longo do plano de simetria, não se observando diferença significativa em relação a simulação com *2-step*.

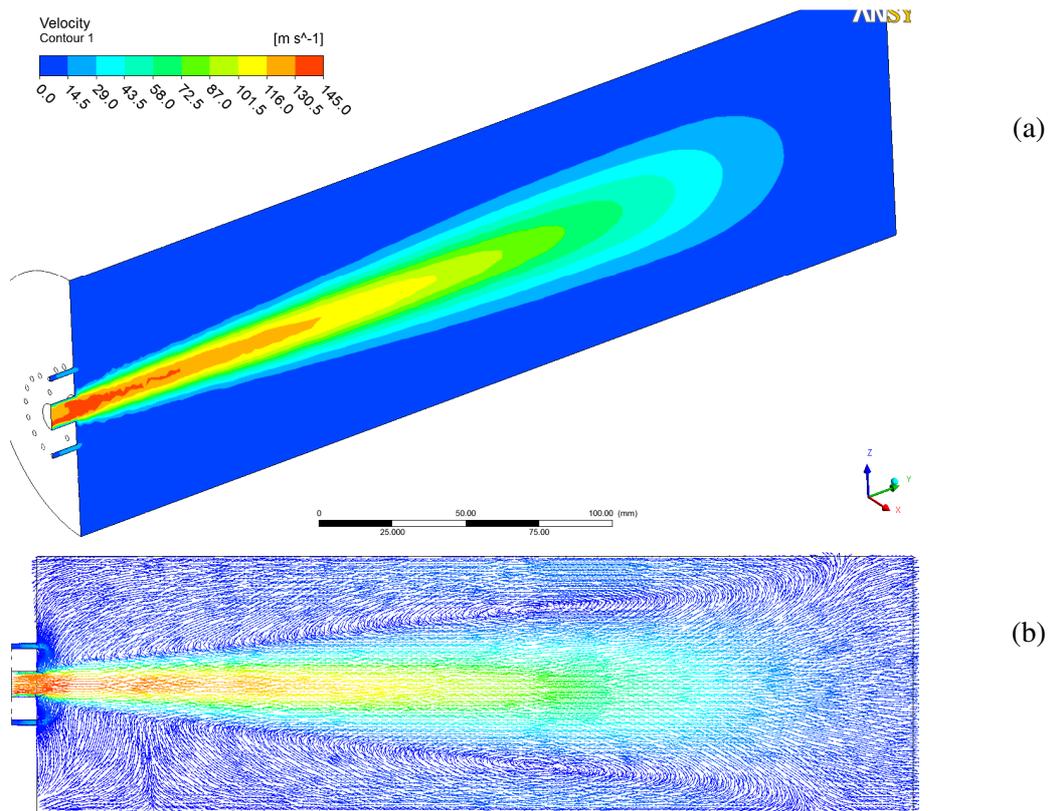


Figura 6.66 Velocidade para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no plano de simetria:  
(a) contorno e (b) vetores velocidade.

A Figura 6.67 tem-se o contorno de temperatura ao longo do plano de simetria, considerando a química detalhada (GRIMech3.0). Nota-se que a temperatura está mais atenuada não ultrapassando 1650 °C, contrariamente aos resultados numéricos da simulação com 2-step, cujo valor máximo foi 2150 °C.

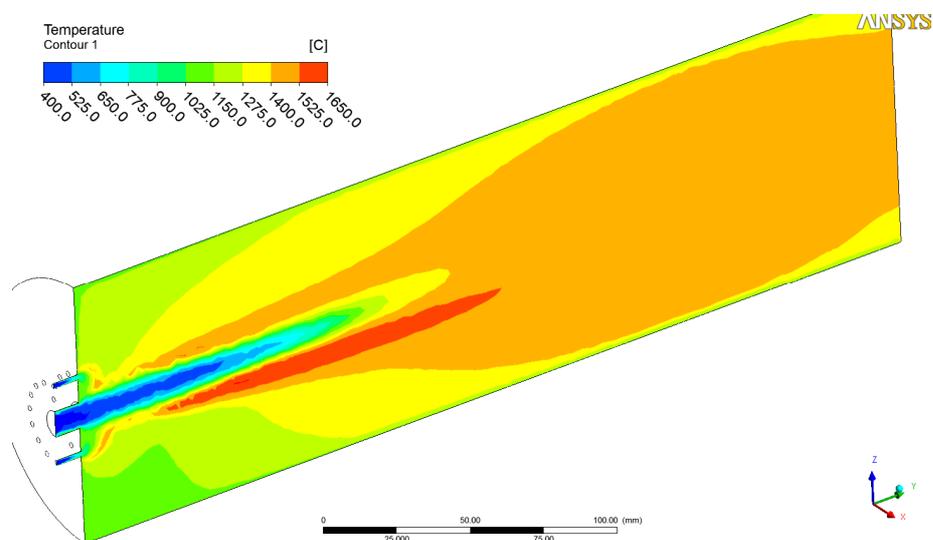


Figura 6.67 Contorno de temperatura para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO no plano de simetria.

A Figura 6.68 apresenta o contorno de CO usando química detalhada (GRIMEch3.0). Analisando os resultados da simulação com *2-step*, na Figura 6.50, nota-se que o comportamento foi semelhante porém com valores maiores, aproximando dos resultados experimentais disponíveis.

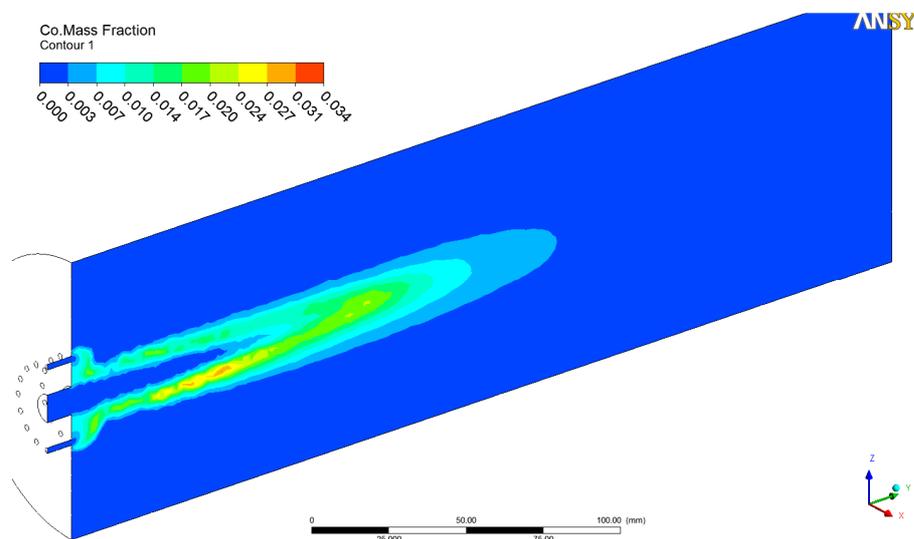


Figura 6.68 Contorno de CO para KER/EDC\_GRIMEch3.0/DO no plano de simetria.

Um dos indicativos da região de chama é o radical OH, em medidas de quimiluminescência, sobretudo no regime de combustão Sem Chama Visível cuja frente de chama não está definida. Na Figura 6.69, a distribuição da fração mássica de OH é apresentada. Nota-se que a região de chama é distribuída, atingindo toda a extensão da câmara, como esperado no regime Sem Chama Visível.

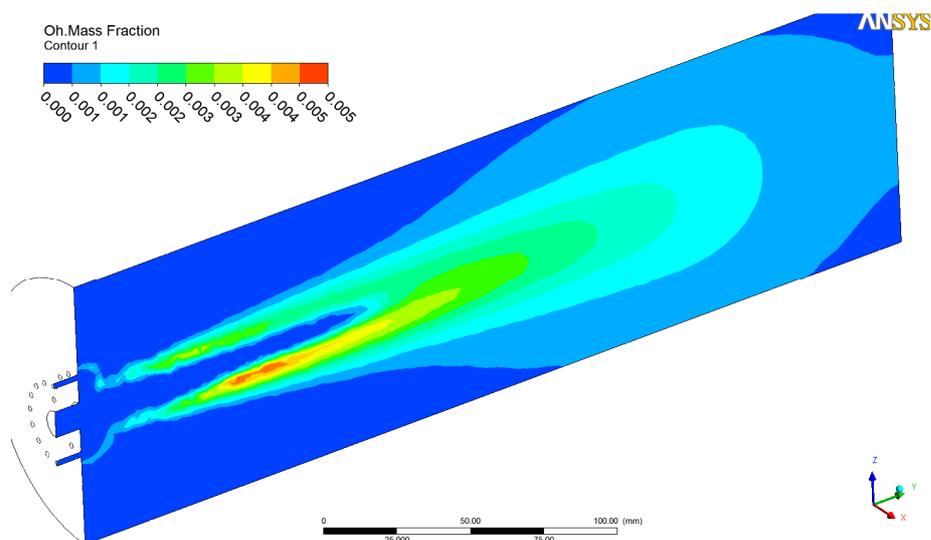


Figura 6.69 Contorno de OH para KER/EDC\_GRIMEch3.0/DO no plano de simetria.

Na Figura 6.70 são mostradas as linhas de corrente de temperatura para a simulação com GRIMEch3.0. Verifica-se a forte recirculação desenvolvida pelo escoamento, assim como na simulação com *2-step*, porém com perfil de temperatura menor.

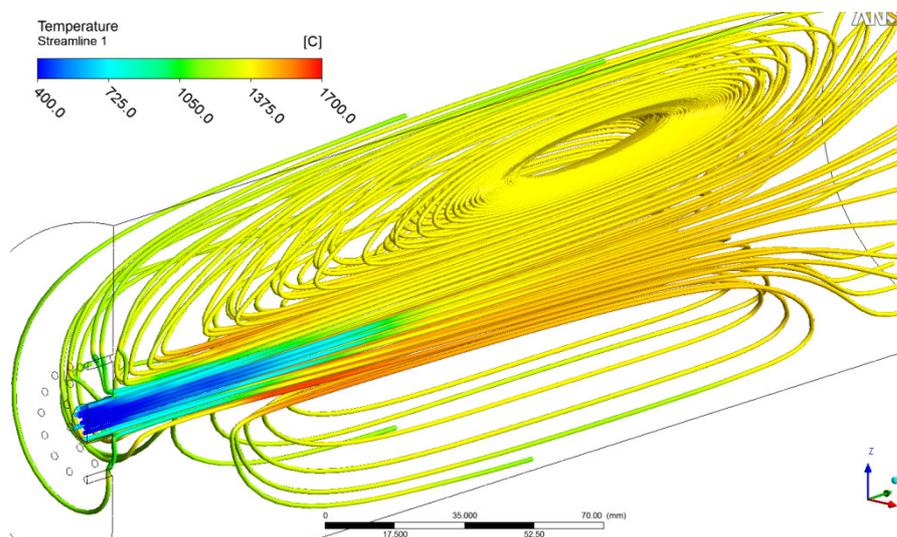


Figura 6.70 Linhas de corrente de temperatura para KER/EDC\_GRIMEch3.0/DO no plano de simetria.

A seguir, são apresentados dos resultados de temperatura,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  e  $NO_x$  utilizando o GRIMEch3.0 ao longo dos planos radiais traçados na Figura 6.71 a Figura 6.75. Em geral, nota-se na vizinhança da região de injeção, a ausência de um pico de temperatura, concordando assim com o conceito do regime de combustão Sem Chama Visível já discutido. Verifica-se também, uma boa concordância entre os resultados numéricos e os dados experimentais, à medida que se aproxima do final da câmara. Em particular na Figura 6.71, a escala empregada na construção do gráfico foi escolhida de modo a uniformizar a apresentação dos resultados e colaborar na comparação com o modelo de combustão *2-step* mostrado no item 6.4.3 desta tese.

Com relação a formação de  $NO_x$ , os valores mais baixos foram resultados tanto do perfil de temperatura mais definido quanto da presença de maior quantidade de espécies intermediárias, o que fornece maiores informações às equações de cálculo de  $NO_x$  do ANSYS Fluent®. Embora ainda maiores se comparado aos dados experimentais, com relação à simulação com *2-step*, foram obtidos valores mais coerentes.

Analisando o consumo de  $O_2$  e formação de  $CO_2$ , estes não tiveram expressiva mudança com relação a simulação *2-step*. Como se tratam de grandezas bem definidas no cálculo do balanço químico, normalmente era esperado pouca variação. Porém, considerando a formação

de CO, as diferenças ainda permanecem, apesar de ter obtido valores mais coerentes ao longo do eixo central, como mostra a Figura 6.60. Neste caso, em virtude da pequena quantidade desta espécie em comparação a O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O, sua correta determinação torna-se complexa, além de envolver parâmetros cinéticos que podem não estar ajustados ao regime de combustão Sem Chama Visível. Assim, mesmo empregando a química mais detalhada, como o caso do GRIMech3.0, os parâmetros embutidos nas reações podem não refletir este problema em especial.

Outro fator preponderante na formação de CO está relacionado com as escalas de tempo empregadas pelo modelo EDC, através do parâmetro de tempo,  $C_\tau$ , cujo valor *default* é 0,4082. Neste caso, a escala de tempo e os parâmetros cinéticos irão definir a quantidade de carbono do combustível que foi oxidado e que não será convertido em CO<sub>2</sub>.

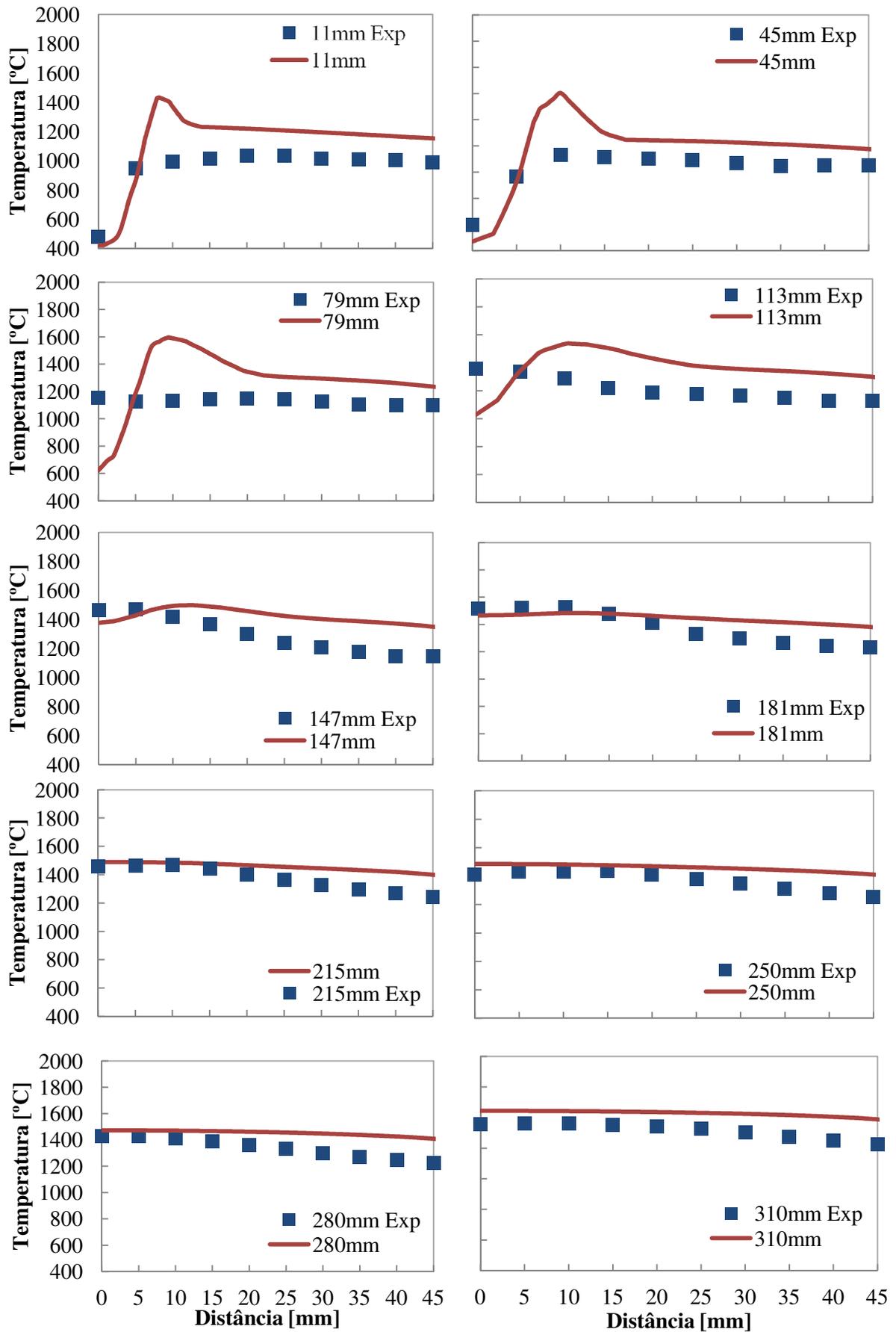


Figura 6.71 Distribuição de temperatura para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.

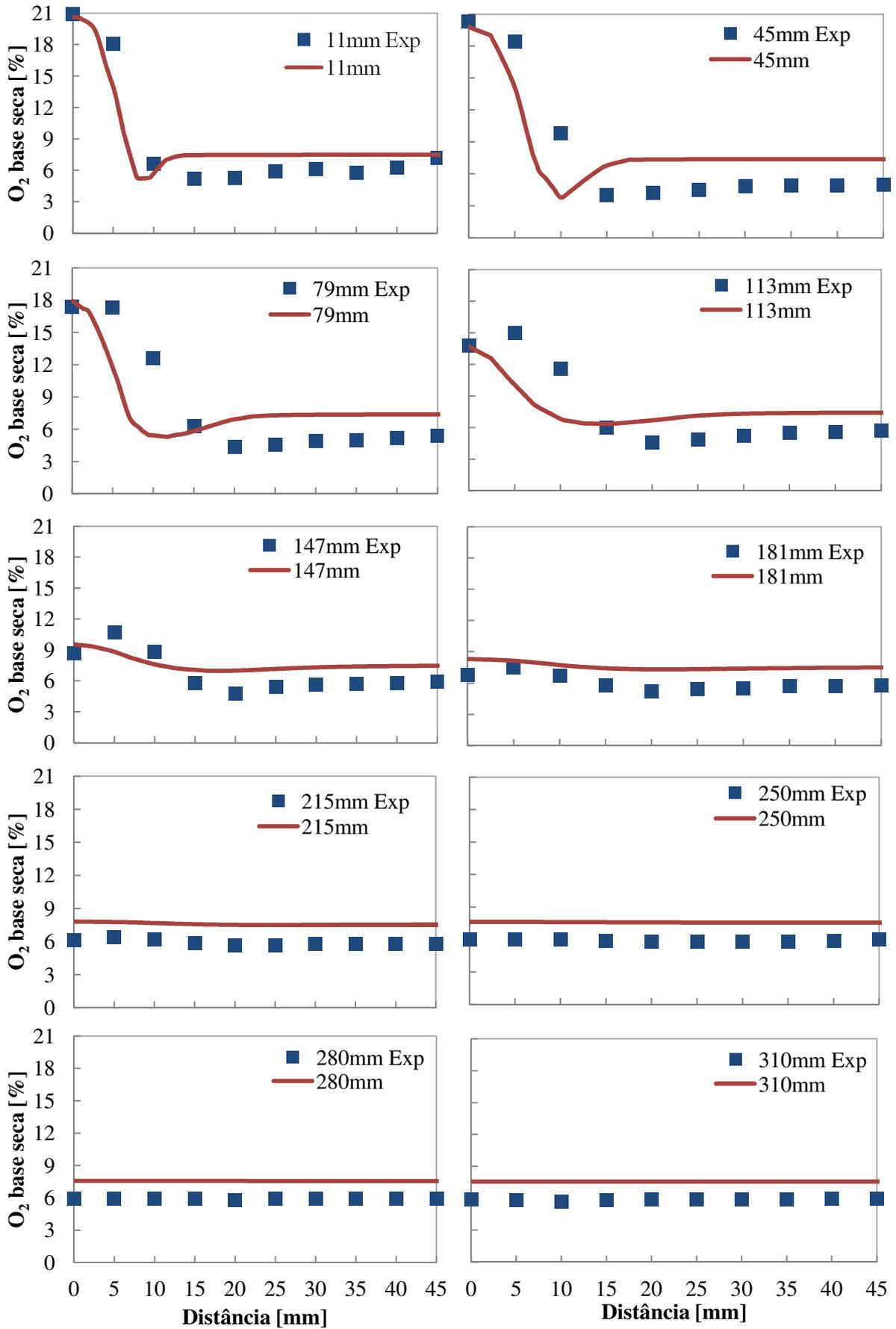


Figura 6.72 Distribuição de  $O_2$  para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.

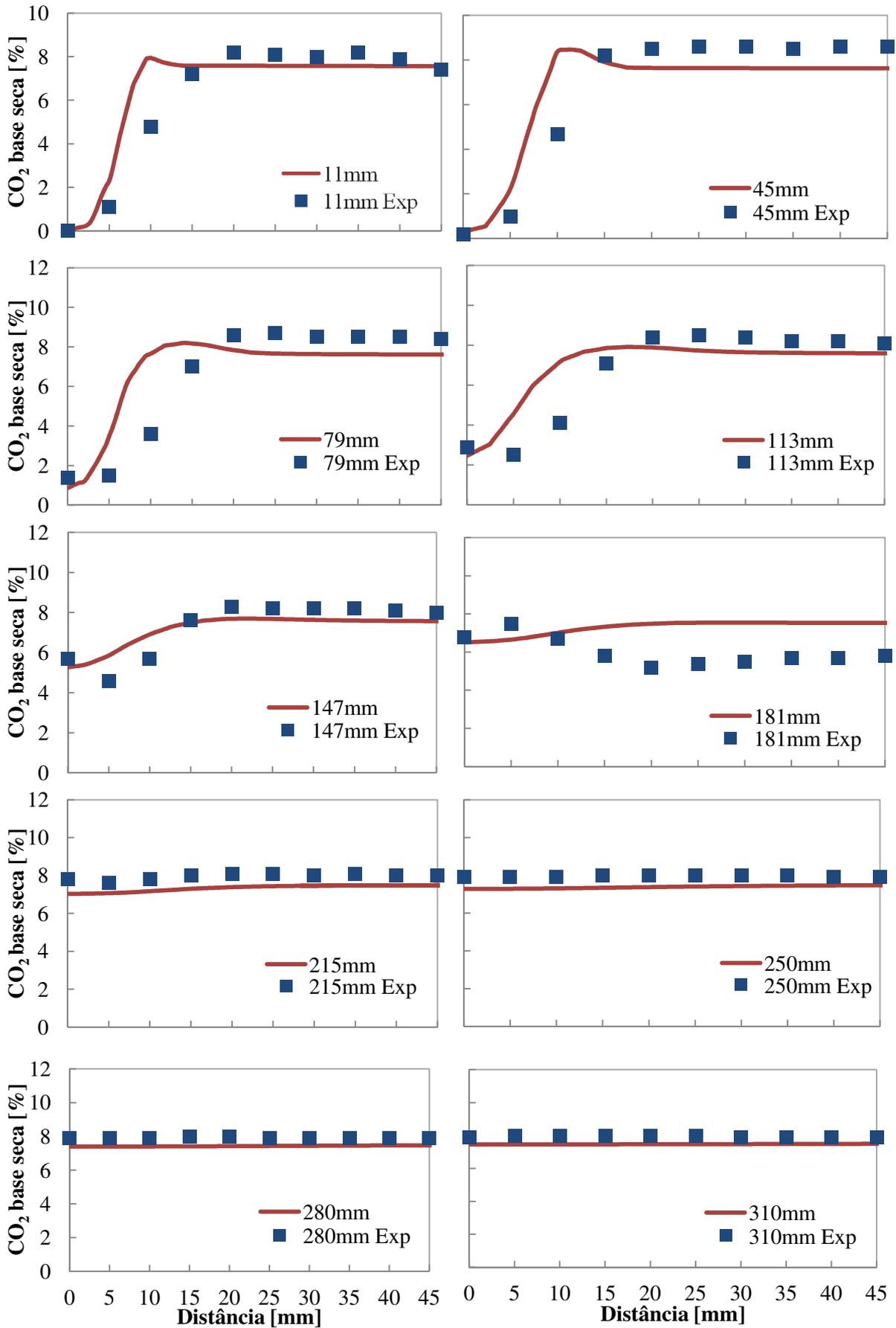


Figura 6.73 Distribuição de CO<sub>2</sub> para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.

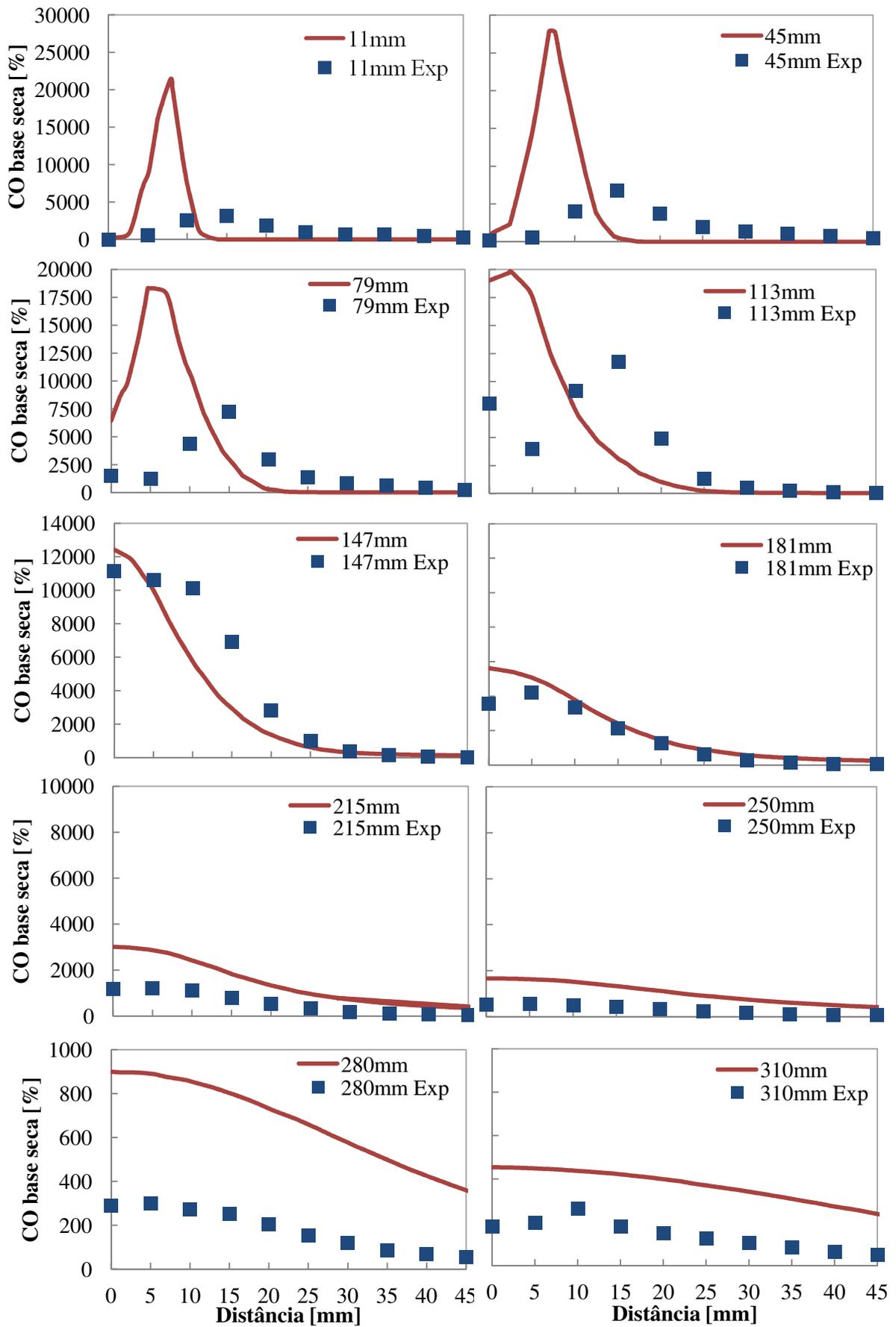


Figura 6.74 Distribuição de CO para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.

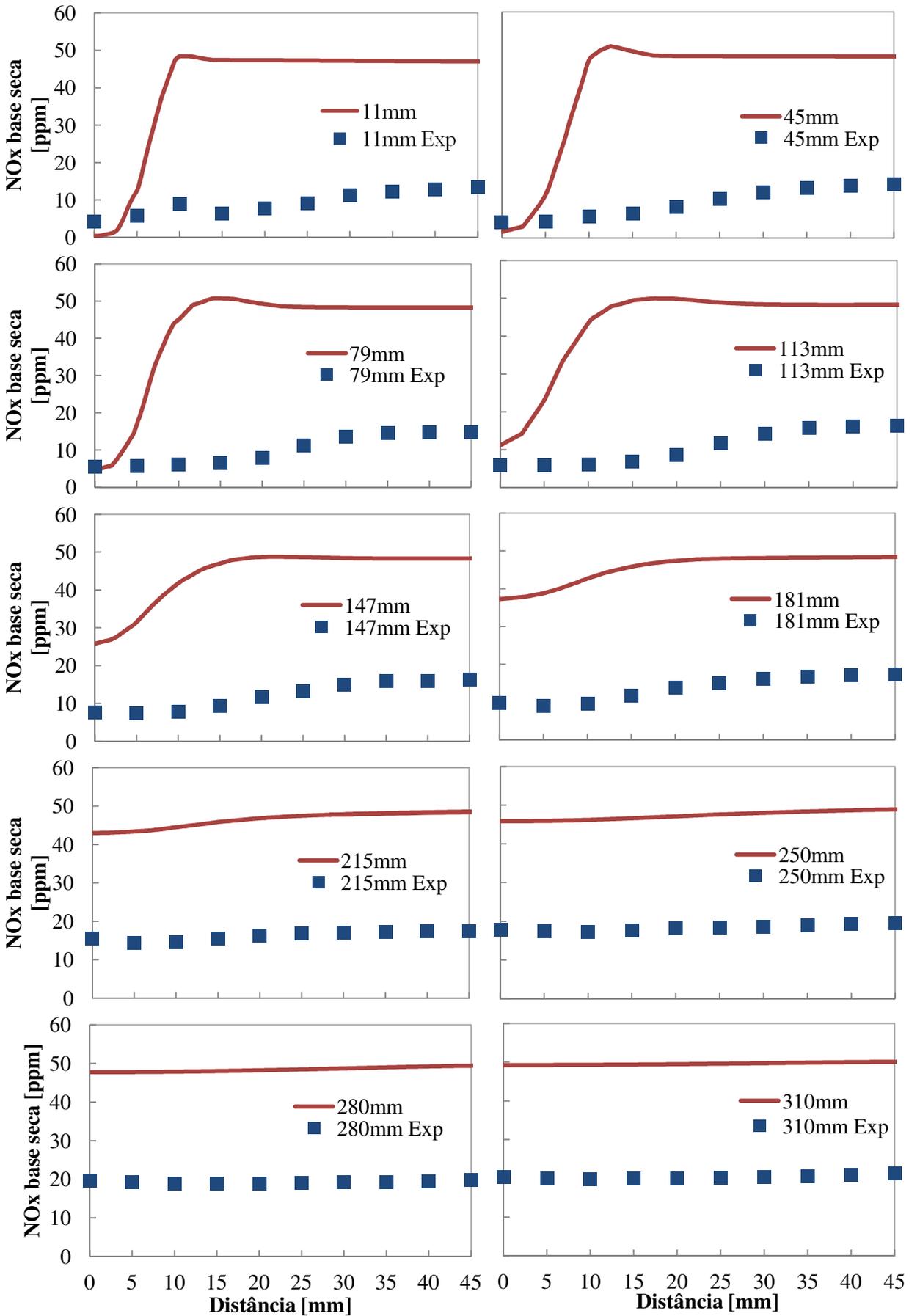


Figura 6.75 Distribuição de NO<sub>x</sub> para KER/EDC\_GRIMech3.0/DO nos planos radiais.

#### 6.4.5 Simulação 5: KER/EDC\_KEE58/DO

Os resultados anteriores para a combinação de modelos KER/EDC\_GRIMech3.0/DO, em geral, tiveram em boa concordância com os resultados experimentais, apesar do excesso de CO formado. Porém, o tempo computacional empregado para a solução conjunta das 325 reações parciais, das variáveis do escoamento e das propriedades da radiação ultrapassou 380 horas de simulação.

Este tempo é necessário para garantir que as propriedades não possuam variação, embora grandezas como velocidade, temperatura, nível de O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O já não variam a partir de um determinado número de iterações. Contudo, na análise da formação de poluentes, cujos valores estão na ordem de partes por milhão, o número de iterações tem forte influência, bem como o desvio alvo que passa a ser 10<sup>-6</sup> ou 10<sup>-7</sup> como critério de convergência.

Assim, caso a geometria fosse mais complexa, o tempo certamente aumentaria, inviabilizando todo o processo. Neste contexto, torna-se necessário a busca por alternativas para redução deste tempo computacional gasto. Uma delas é a simplificação das reações parciais descritas na biblioteca GRIMech3.0, onde para cada tipo de experimento são mantidas aquelas reações e elementos químicos preponderantes. Para tanto, torna-se necessário por vezes alterar as constantes de Arrhenius de modo a compensar a eliminação das demais reações. Uma das bibliotecas testada com a combustão Sem Chama Visível é a chamado KEE58, por Amniam e Galleti (2012) e está mostrada integralmente no Anexo A. Esta é composta de 18 espécies químicas e 58 reações intermediárias, o que representa uma considerável redução se comparado ao GRIMech3.0. A seguir, são apresentados os resultados obtidos com a simulação envolvendo KER/EDC\_KEE58/DO. Vale salientar que os resultados apresentados a seguir foram obtidos com 1/3 do tempo computacional empregado no GRIMech3.0, considerando ainda um perfil de convergência mais acentuado em direção ao valor alvo de 10<sup>-6</sup> para os residuais.

Na Figura 6.76 é mostrado um comparativo do perfil de temperatura ao longo do eixo central entre as bibliotecas GRIMech3.0 e KEE58. Nota-se que o perfil traçado pelos dados numéricos é o mesmo para as duas abordagens, com maior afastamento para a cinética KEE58, ocasionado possivelmente pelas simplificações do modelo no número de espécies e reações intermediárias.

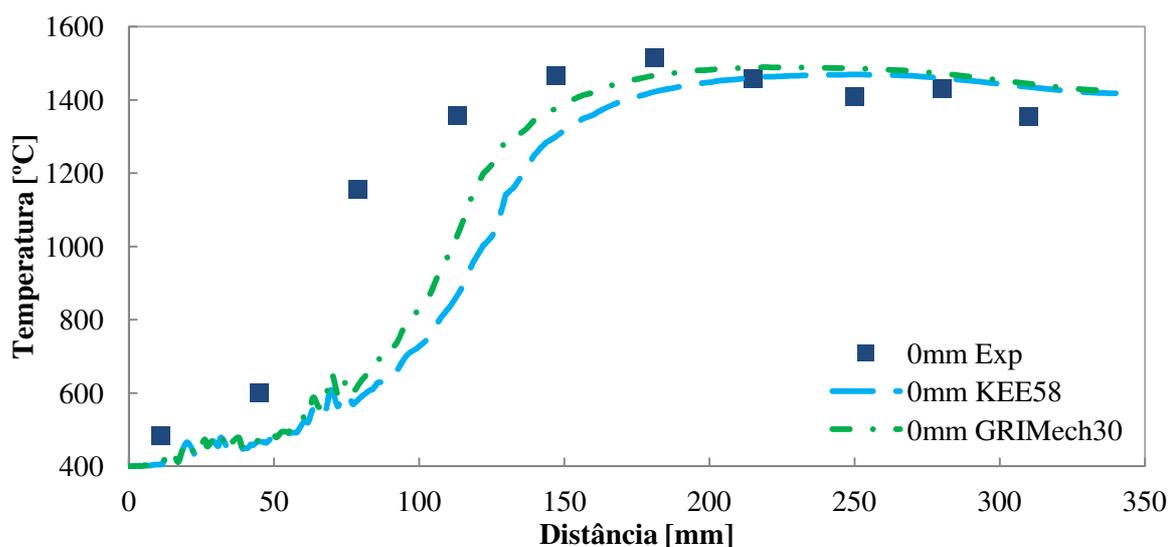


Figura 6.76 Comparativo de temperatura entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.

De acordo com a Tabela 6.11, os desvios entre a cinética KEE58 e GRIMech3.0 foram calculados, a fim facilitar a comparação entre os resultados. Nota-se entre 79 mm e 147 mm a região de maiores desvios entre as duas cinéticas, porém ainda pequenos pelas diversas simplificações presentes na cinética KEE58.

Tabela 6.11 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura entre KEE58 e GRIMech3.0

Distância (mm)	Simulação	Simulação	Desvio relativo (%)
	KER/EDC_KEE58/DO (°C)	KER/EDC_GRIMech30/DO (°C)	
11	404,7	412,1	1,8
45	467,6	470,2	0,6
79	591,6	636,3	7,0
113	891,3	1066,6	16,4
147	1296,4	1374,6	5,7
181	1421,1	1466,3	3,1
215	1460,7	1488,6	1,9
250	1469,4	1486,4	1,1
280	1458,8	1471,3	0,9
310	1438,9	1445,2	0,4

O consumo de  $O_2$  e a formação de  $CO_2$  ao longo do eixo central, tanto para KEE58 quanto GRIMech3.0 são apresentadas na Figura 6.77 e Figura 6.78 respectivamente. Nota-se que o perfil é bem semelhante como esperado, uma vez que as reações de formação das espécies químicas principais foram mantidas durante a simplificação no KEE58 e, sendo preponderantes sobre os demais.

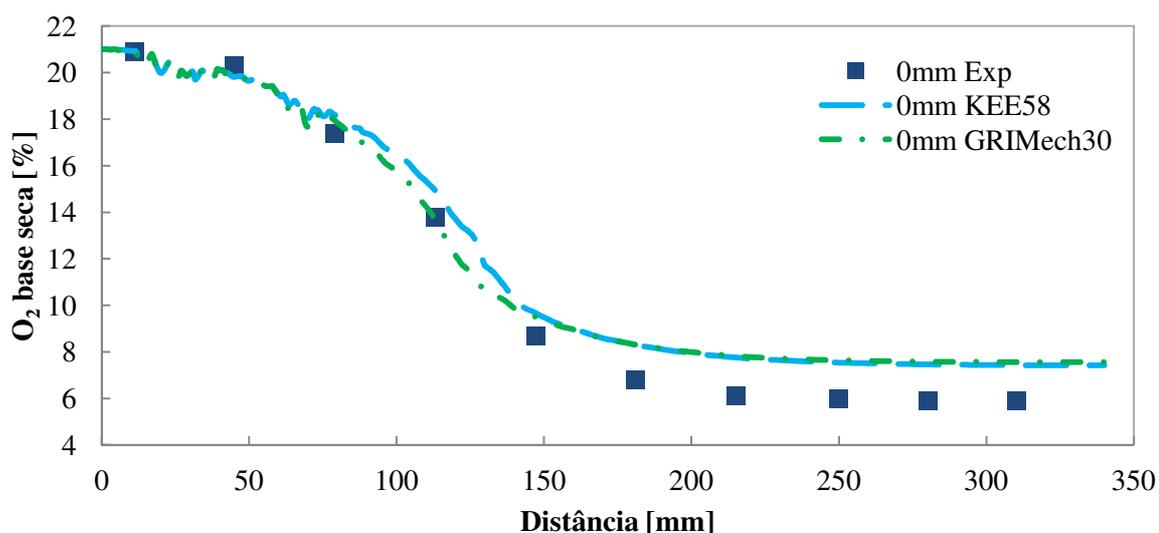


Figura 6.77 Comparativo de  $O_2$  entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.

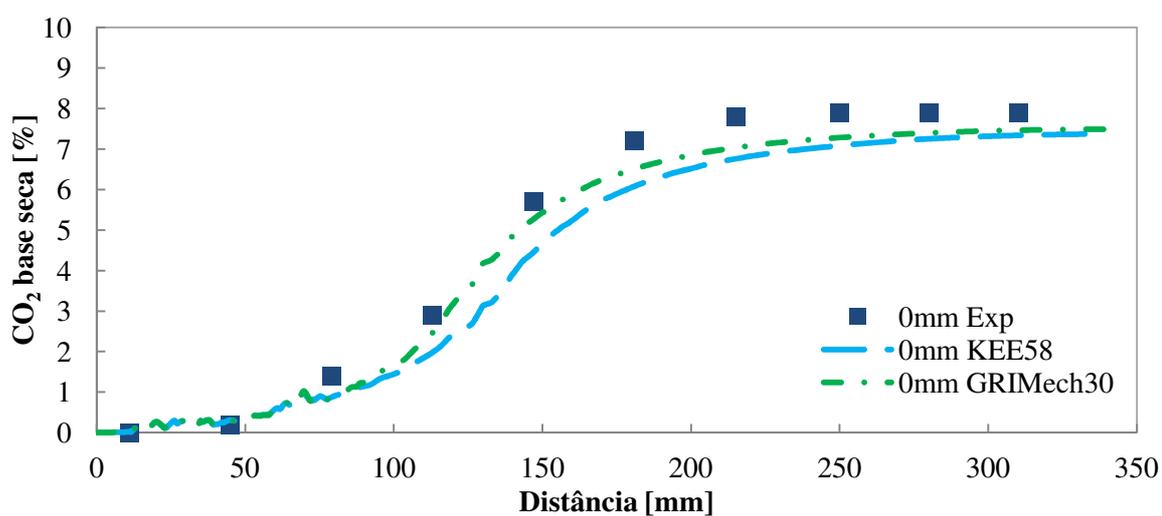


Figura 6.78 Comparativo de  $CO_2$  entre KEE58 *versus* GRIMech3.0 no eixo central.

Na Figura 6.79 a formação de CO ao longo do eixo central entre KEE58 e GRIMech3.0 é apresentada. Pode-se observar que o perfil para KEE58 foi deslocado, aproximando-se do comportamento experimental. Porém, o valor máximo foi maior 15,6 % em relação à simulação com GRIMech3.0, possivelmente pelo fato de algumas reações terem sido desprezadas.

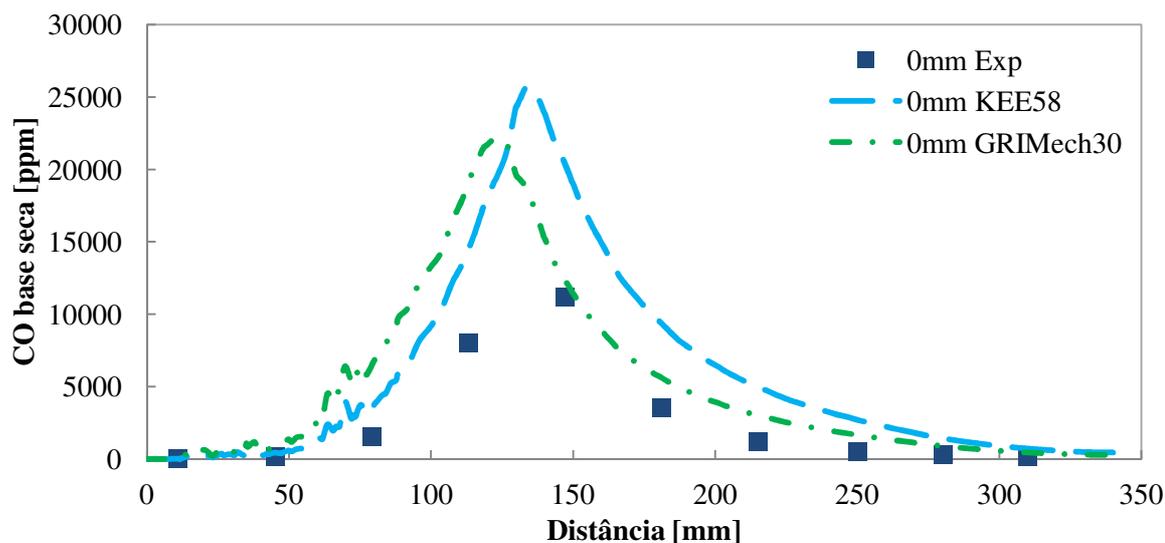


Figura 6.79 Comparativo de CO entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.

Finalmente, na Figura 6.80 é mostrado um comparativo da formação de  $\text{NO}_x$  entre a cinética KEE58 e GRIMech3.0, ao longo do eixo central. Nota-se que o KEE58 teve concordância até 1/3 da câmara, distanciando-se até atingir um máximo de 60 ppm. Analisando as reações presentes na cinética KEE58 e listadas no Anexo A, verifica-se que aquelas responsáveis pela formação de NO foram eliminadas, o que resulta em menos dados e informações para os chamados *pathways* presentes no ANSYS Fluent®. Em resumo, os *pathways* são funções e equações que determinam a taxa de formação do poluente a partir da concentração resultante do balanço químico. Assim, na ausência dos valores de concentração de uma dada espécie, a taxa de formação calculada poderá ser superestimada.

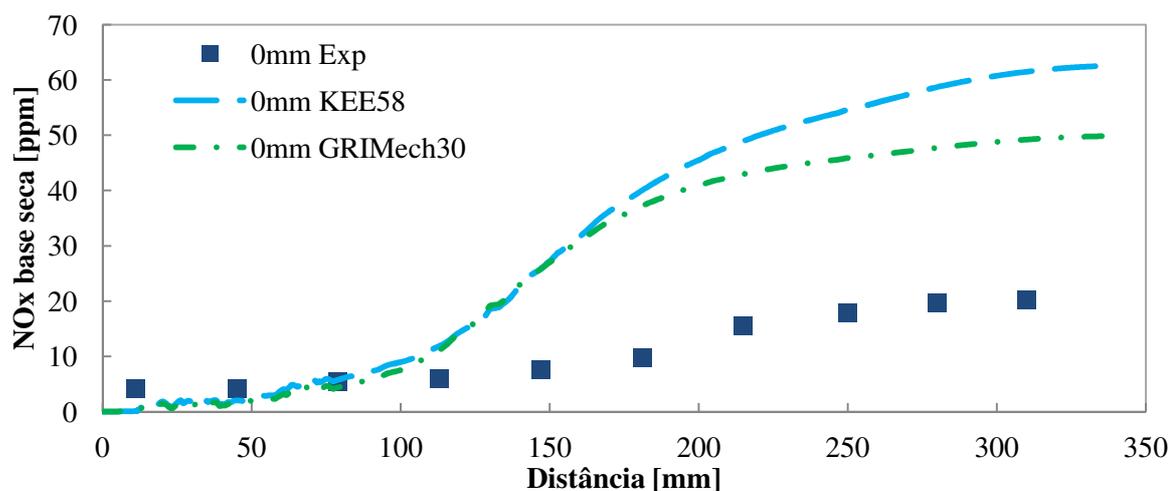


Figura 6.80 Comparativo de  $\text{NO}_x$  entre KEE58 x GRIMech3.0 no eixo central.

#### 6.4.6 Simulação 6: KER/EDCMod\_KEE58/DO

A partir dos resultados obtidos com a simplificação da cinética química através da biblioteca KEE58, no item 6.4.5, observou-se que os resultados em termos de temperatura, teor de O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> tiveram um pequeno desvio da simulação detalhada com GRIMech 3.0, que pode ser aceito se considerarmos o tempo computacional menor empregado. Contudo, os resultados obtidos para a formação de CO mostrados na Figura 6.79, sofreram maior variação entre as cinéticas, tanto em valor quanto no perfil que foi deslocado, revelando maior sensibilidade na modelagem.

Um fator com forte influência na formação dos poluentes, dos quais se inclui o monóxido de carbono, é o tempo de residência do escoamento no interior da câmara. Akbari (2013) investigou o papel do tempo de residência nos níveis de CO e NO<sub>x</sub> durante o processo de combustão. O autor verificou que o nível de CO produzido reduz com aumento do tempo de residência, em razão da redução da concentração de átomos de oxigênio molecular, o que contribui para formar menos CO. Além disso, CO possui mais tempo para reagir com O<sub>2</sub> e formar CO<sub>2</sub>. Quanto ao NO<sub>x</sub>, segundo Akbari (2013), este também reduz com aumento do tempo de residência, porém moderadamente.

Tendo em vista que neste trabalho tem-se empregado a modelagem RANS, ou seja, uma abordagem média no tempo, a presença desta variável não ocorre diretamente. Particularmente, no modelo EDC, a combustão é considerada nas menores escalas, chamadas de Kolmogorov, além de assumir que a célula é um reator bem misturado a pressão constante, conforme visto no item 4.9.1 desta tese. Contudo existem dois parâmetros importantes do modelo, relacionados com as escalas de comprimento e de tempo, que são respectivamente  $C_\xi$  e  $C_\tau$ .

Aminian *et al.* (2012) investigaram o efeito da escala de tempo,  $C_\tau$ , do modelo EDC no regime Sem Chama Visível. O valor *default* de 0,4083 foi alterado para 1,5 e 3,0, mantendo constante o valor *default* de  $C_\xi = 2,1377$ . Em todos os cenários, o aumento da constante de tempo melhorou os resultados, sobretudo reduzindo o pico de temperatura e concentração de espécies, CO e OH. Segundo os autores, o aumento deste parâmetro pode ser interpretado como um enfraquecimento da intensidade da reação.

Neste contexto avaliou-se o resultado do aumento deste parâmetro empregando a cinética KEE58, que apresentou bons resultados num espaço menor de tempo. Assim foram definidas como modificação 1 (Mod1) a alteração para  $C_\tau = 1,5$ , como modificação 2 (Mod2)

o valor de  $C_\tau = 3,0$  e apenas KEE58 com *default*,  $C_\tau = 0,4083$ .

Na Figura 6.81 tem-se um comparativo do perfil de temperatura ao longo do eixo central, mediante variação no parâmetro  $C_\tau$  do modelo EDC. Nota-se que através do aumento da escala de tempo, o perfil de temperatura ficou mais alongado, embora a temperatura máxima e final tenha permanecido a mesma. Isto pode ser reflexo de um atraso ocasionado no início da combustão.

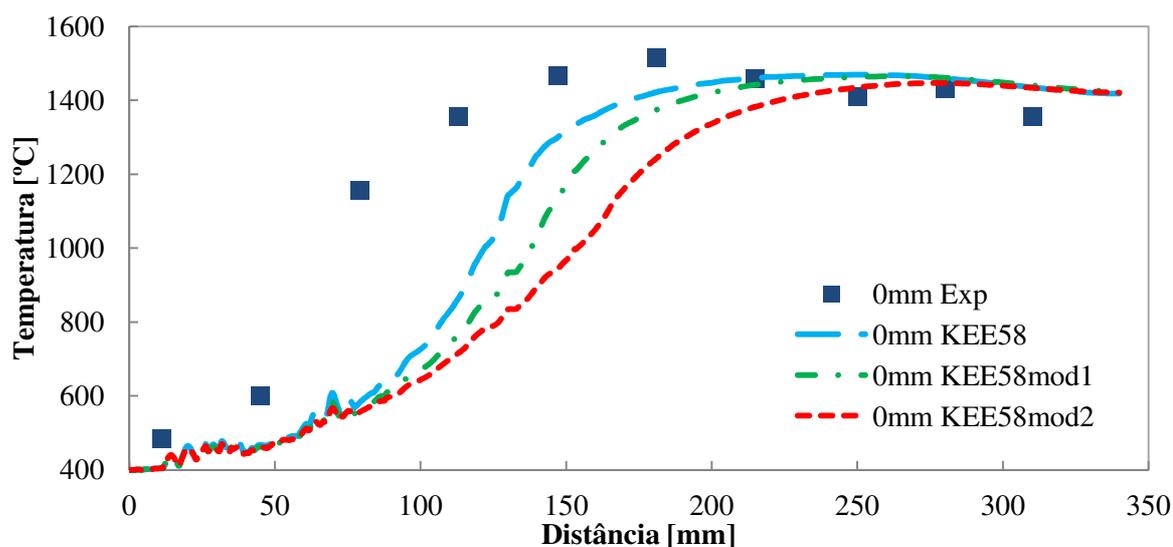


Figura 6.81 Comparativo de temperatura entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.

De acordo com a Figura 6.82, o consumo de  $O_2$  ao longo do eixo central pode ser analisado. Novamente, o valor final da concentração de  $O_2$  não teve alteração, mesmo variando os cenários. Contudo a medida que se aumentou a escala de tempo, os valores numéricos afastaram dos dados experimentais, notadamente na metade da câmara.

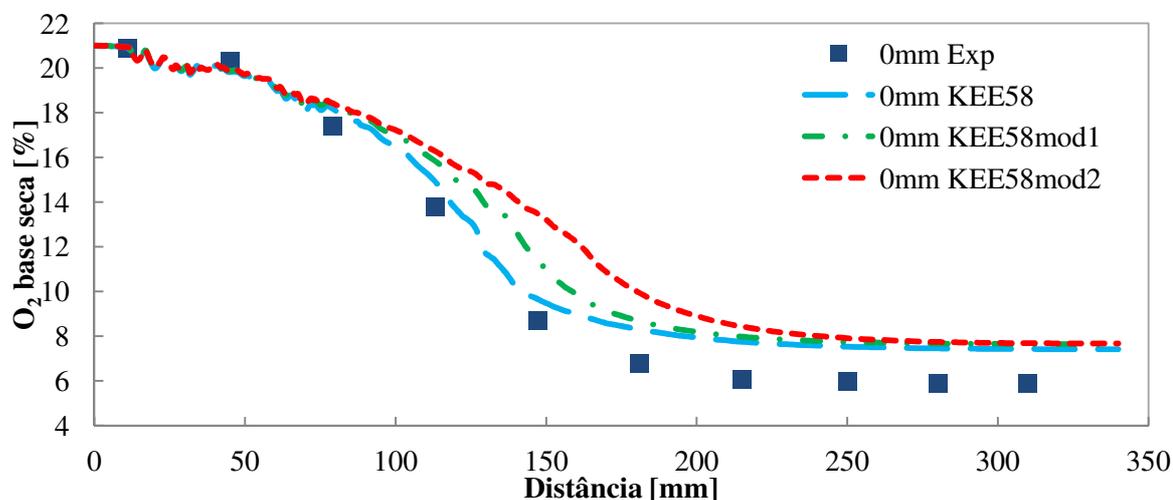


Figura 6.82 Comparativo de  $O_2$  entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.

Uma análise semelhante pode ser feita na Figura 6.83, que apresenta a formação de CO<sub>2</sub> no eixo central nas modificações efetuadas, onde puderam ser observados maiores diferenças também na metade da câmara.

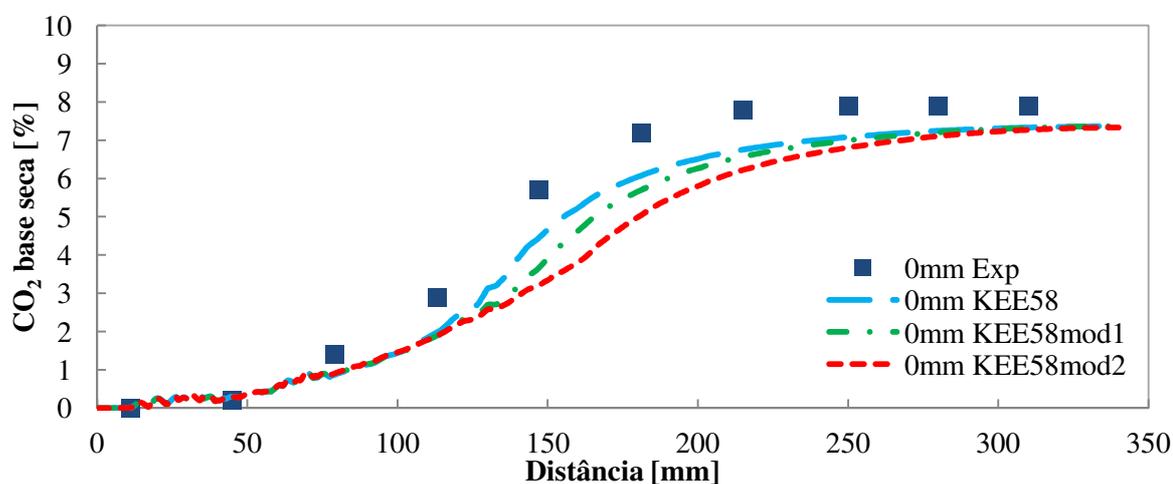


Figura 6.83 Comparativo de CO<sub>2</sub> entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.

Na Figura 6.84 a distribuição de CO ao longo do eixo central é apresentada de acordo com os cenários analisados. É possível confirmar a teoria discutida por Aminian *et al.* (2012), onde o aumento na escala de tempo reduz o teor máximo de CO formado. Analisando a Figura 6.84, pode-se concluir que para  $C_\tau = 0,4083$  (*default*) o valor máximo atingiu 25.695 ppm, para  $C_\tau = 1,5$  o valor de 18.780ppm e  $C_\tau = 3,0$  o valor de 12.059 ppm. Em comparação com o valor experimental máximo de 11.171 ppm, o ajuste na constante de tempo do modelo EDC se faz necessária, e que o valor  $C_\tau = 3,0$  esteve o mais próximo. Ainda, analisando o formato do perfil, nota-se que o mesmo se ajustou melhor à curva experimental.

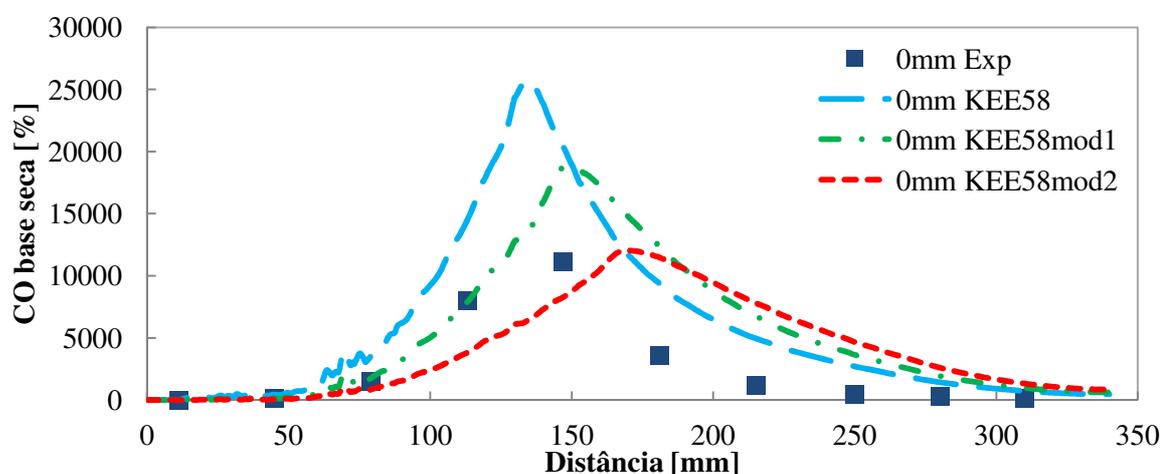


Figura 6.84 Comparativo de CO entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.

A Figura 6.85 mostra um comparativo da formação de  $\text{NO}_x$  no eixo central em diversos cenários. Como descrito por Aminian *et al.* (2012), a formação de NO é afetada de maneira moderada com a modificação da constante de tempo. Verifica-se uma pequeno afastamento próximo à metade da câmara, porém o comportamento geral não sofreu alteração.

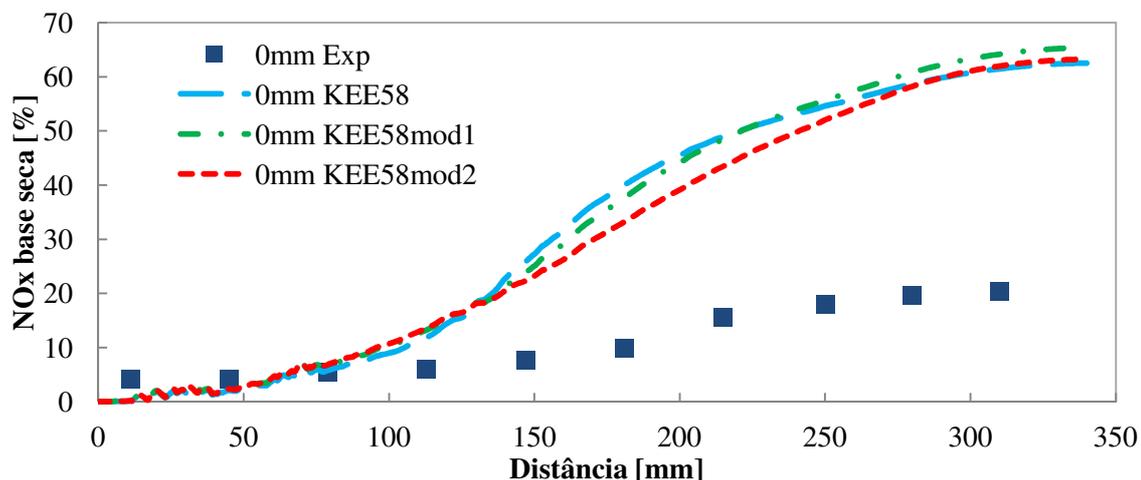


Figura 6.85 Comparativo de  $\text{NO}_x$  entre KEE58 x Mod1 x Mod2 no eixo central.

Finalmente, pode-se concluir com os resultados obtidos, que embora a cinética detalhada, no caso KEE58, possua maiores informações a respeito dos elementos e das reações envolvidas, parâmetros matemáticos envolvidos nos modelos numéricos do ANSYS Fluent® devem ser ajustadas à aplicação em estudo. Neste contexto, a necessidade de ajustes é mais ampliada quando se investiga um novo regime de combustão conforme objetivo deste trabalho.

#### 6.4.7 Simulação 7: KER/FRED2step/DO

De modo a investigar alternativas de redução do tempo computacional gasto, foi testado a combinação KER/FRED2Step/DO, com uso do modelo de combustão *Finite Rate/Eddy Dissipation*, denominado neste trabalho de FRED. O modelo FRED apresenta algumas vantagens com relação ao modelo EDC, uma vez que simplifica o processo de cinética química envolvido. Além disso, emprega simultaneamente dois modelos FR e ED, que são ativados dependendo das condições térmicas e aerodinâmicas em uma dada região do domínio. Contudo, a presença do modelo ED fornece características de cinética rápida, onde admite-se que o processo de combustão ocorre a uma taxa global de reação, não envolvendo

detalhamentos de cinética. Por último, a taxa efetiva de reação empregada é a menor dentre as abordagens *Finite Rate* e *Eddy Dissipation* (ANSYS INC., 2011).

Na Figura 6.86 é mostrado perfil de temperatura ao longo do eixo central. Nota-se que persiste o desvio na região de forte turbulência, conforme detalhado pelos desvios na Tabela 6.12, revelando um atraso no instante de início da rampa de temperatura, causado pelas características do modelo. Ainda, na região de saída o valor máximo alcançado superou os resultados anteriores obtidos. Contudo, diante da simplificação empregada pelo modelo, o comportamento geral se mostrou adequado. Os perfis de  $O_2$  consumido e  $CO_2$  formado foram também investigados, não apresentando desvios significativos.

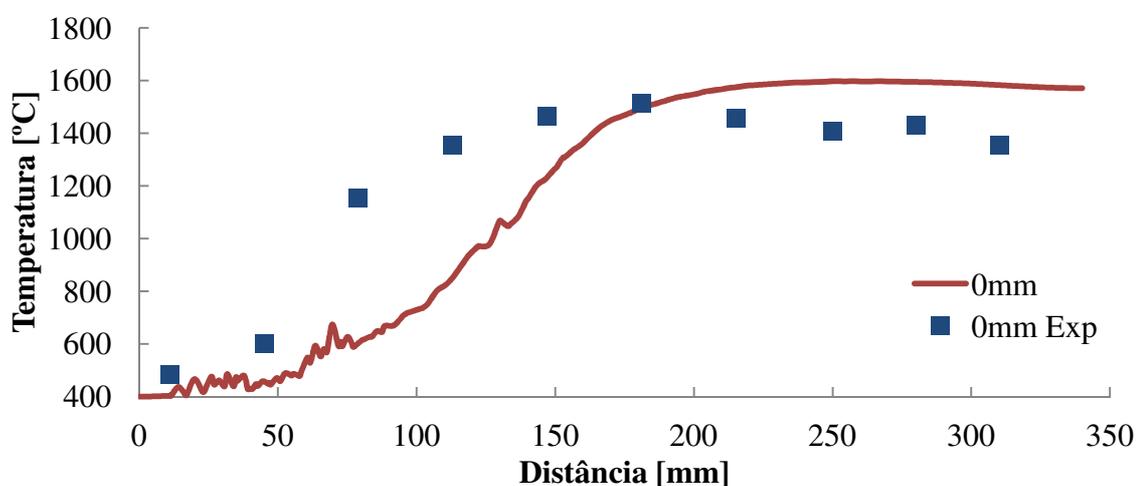


Figura 6.86 Distribuição de temperatura para KER/FRED2step/DO no eixo central.

Tabela 6.12 Avaliação do desvio na distribuição de temperatura para KER/FRED2step/DO

Distância (mm)	Experimental (°C)	Simulação KER/FRED2step/DO (°C)	Desvio relativo (%)
11	484,0	403,24	16,69
45	600,5	458,37	23,67
79	1157	614,26	46,91
113	1356,9	879,73	35,17
147	1466	1225,79	16,39
181	1515,8	1494,57	1,40
215	1459,5	1575,42	7,94
250	1408,6	1597,46	13,41
280	1431,6	1594,64	11,39
310	1355,3	1583,21	16,82

Apesar da distribuição de temperatura ao longo do eixo central ter apresentado um comportamento semelhante aquele traçado pelos dados experimentais, picos de elevada

temperatura, cerca de 2.000 °C, foram identificados durante análise de parte dos perfis radiais, principalmente no início da câmara a 11 mm, 45 mm, 79 mm e 113 mm, conforme destacado na Figura 6.87. Foi mantida nos gráficos desta figura uma escala única a fim de abranger todos os planos radiais de interesse.

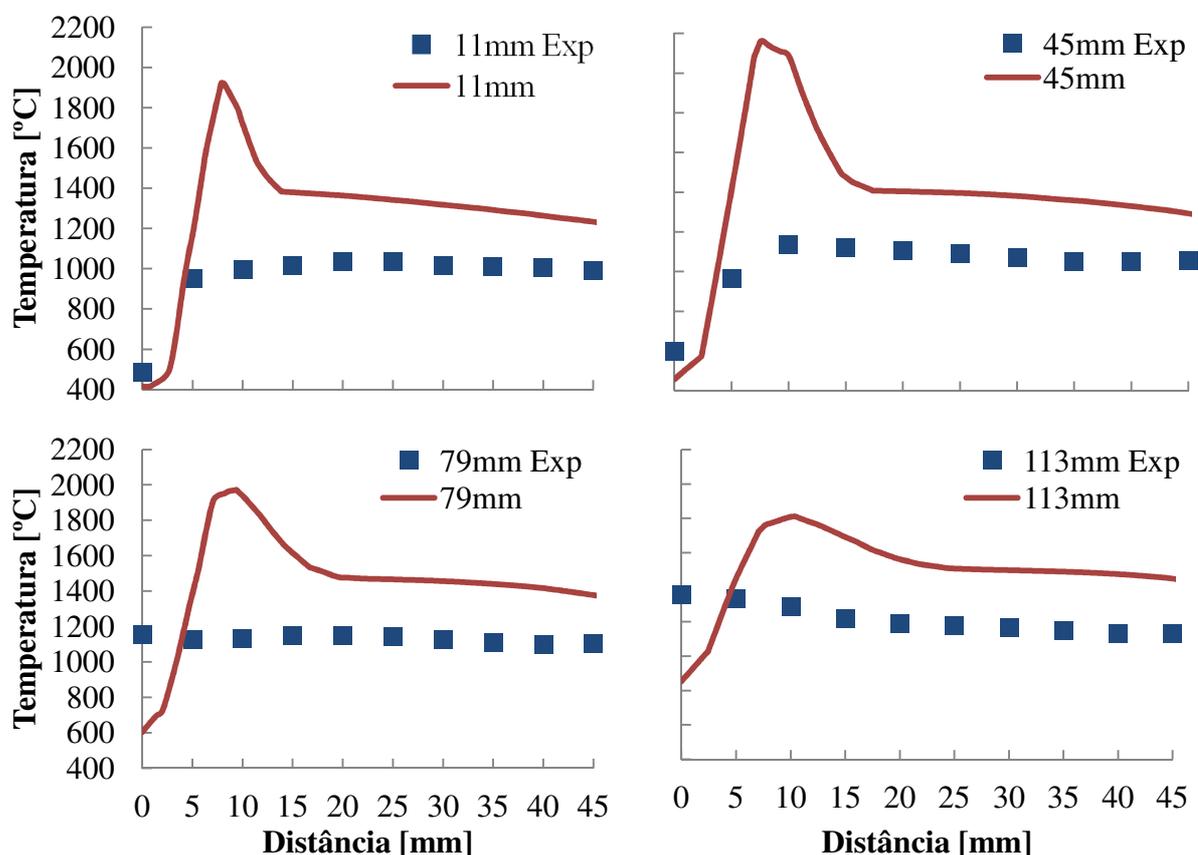


Figura 6.87 Distribuição de temperatura para KER/FRED2step/DO nos planos radiais.

A Figura 6.88 apresenta o contorno da temperatura ao longo do plano de simetria, podendo identificar claramente regiões de elevadas temperaturas. Tal cenário, irá refletir negativamente no perfil de  $\text{NO}_x$  formado, principalmente pela via térmica, aumentando demasiadamente o valor máximo obtido, conforme pode-se verificar na Figura 6.89.

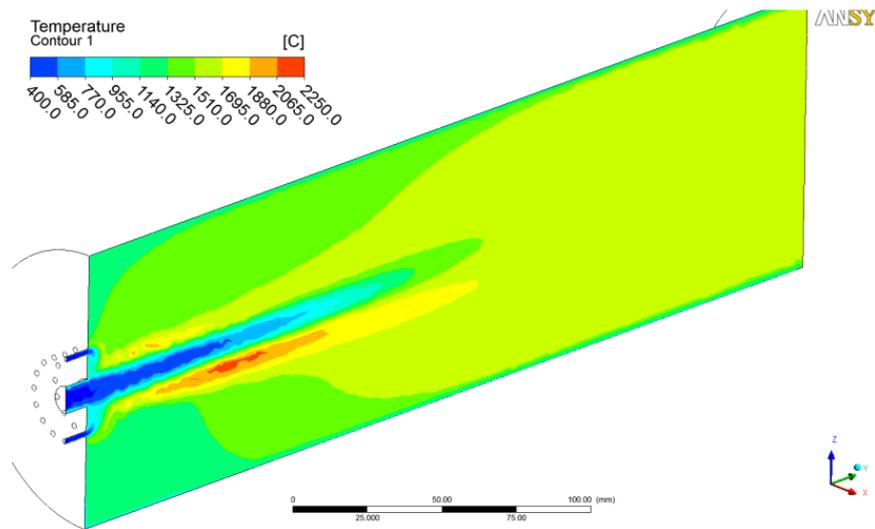


Figura 6.88 Contorno de temperatura para KER/FRED2step/DO no plano de simetria.

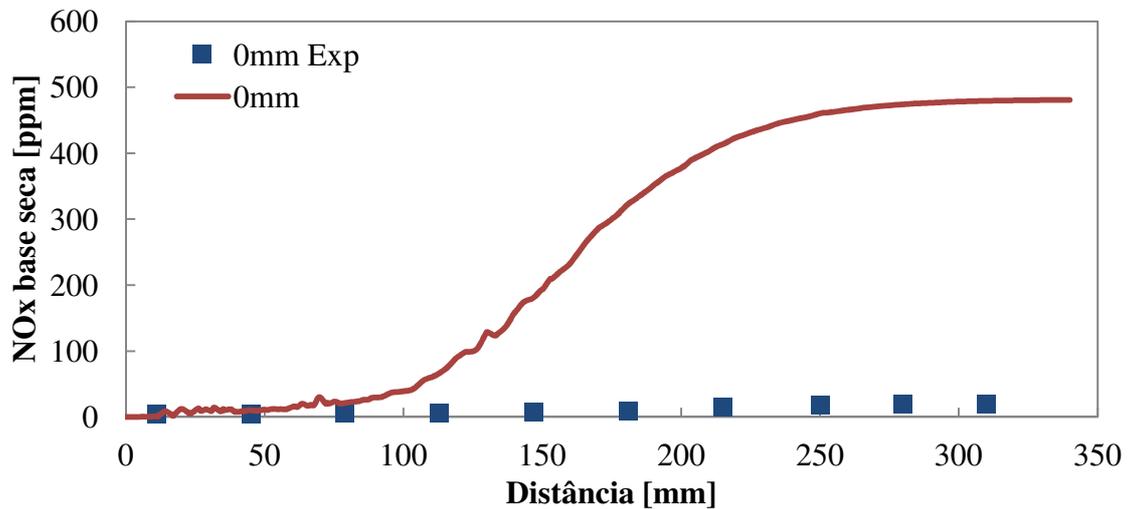


Figura 6.89 Distribuição de  $\text{NO}_x$  para KER/FRED2step/DO no eixo central

A modelagem de CO é apresentada na Figura 6.90. Nota-se que os resultados numéricos com esta combinação de modelos não condiz com o perfil traçado pelos dados experimentais. Considerando os resultados para cinética química *2-step* obtidos no item 6.4.3, Figura 6.42, porém com modelo de combustão EDC, nota-se que o comportamento é semelhante ao da Figura 6.90, ou seja, com valores mínimos. Neste caso, resta investigar modificações nos parâmetros matemáticos do modelo de combustão de modo a corrigir possivelmente este problema.

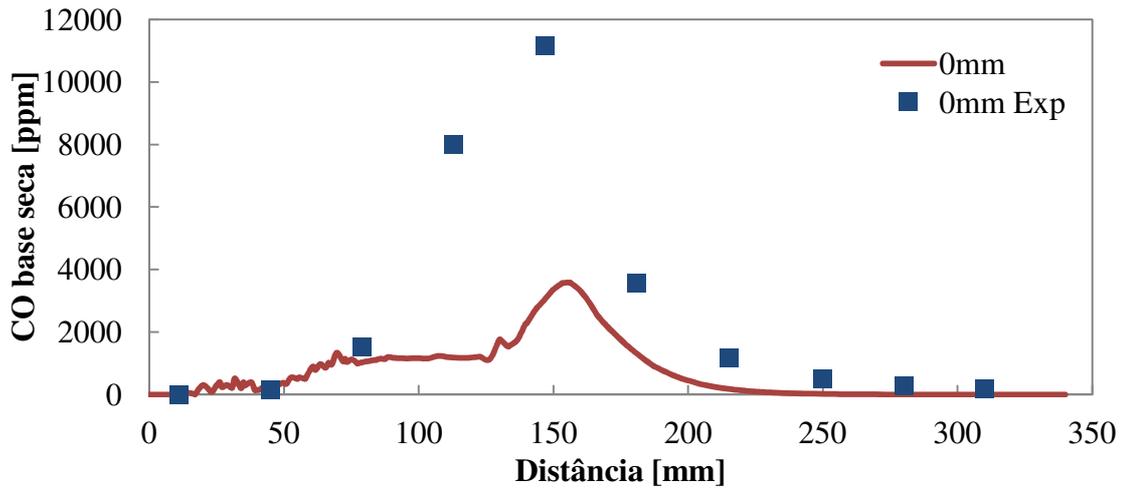


Figura 6.90 Distribuição de CO para KER/FRED2step/DO no eixo central

Neste contexto e de modo a corrigir tais deficiências da modelagem com FRED, Lupant *et al.* (2007) propuseram mudanças nas constantes do modelo ED, conhecidas como A e B, afim de ajustar ao regime de combustão Sem Chama Visível. Desta forma, foram investigados os resultados desta proposição nesta câmara, descritos em detalhes a seguir.

#### 6.4.8 Simulação 8: KER/FREDMod2step/DO

No modelo ED, a taxa líquida de produção,  $R_{i,r}$ , de uma dada espécie,  $i$ , devido a reação,  $r$ , é dada pelo modelo como o menor valor entre as duas expressões, 6.3 e 6.4 (ANSYS INC., 2011):

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_{\mathcal{R}} \left( \frac{Y_{\mathcal{R}}}{v'_{\mathcal{R},r} M_{w,\mathcal{R}}} \right) \quad (6.3)$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v'_{j,r} M_{w,j}} \quad (6.4)$$

sendo

$Y_P$  = fração mássica de qualquer espécie nos produtos,  $P$

$Y_{\mathcal{R}}$  = fração mássica de um reagente particular,  $\mathcal{R}$

A = constante empírica igual a 4,0 (*default*)

B = constante empírica igual a 0,5 (*default*)

De acordo com Lupant *et al.* (2007) a constante A afeta diretamente a velocidade da taxa de reação, enquanto que a constante B está relacionada com os produtos. Assim,

baseando em outros trabalhos pesquisados pelos autores, o valor da constante A foi modificada para 0,6 afim de reduzir a taxa de reação e a constante B para  $10^{20}$ , de modo a garantir que a concentração dos produtos da combustão nunca venha limitar a taxa de reação. Neste caso, as modificações sugeridas por Lupant *et al.* (2007) foram as mesmas investigadas neste trabalho. Contudo, outros valores devem futuramente ser investigados, o que poderá levar à melhores aproximações.

Vale salientar que os conceitos empregados pelos autores para determinar os valores das constantes estão diretamente relacionados com as características do regime de combustão Sem Chama Visível, principalmente quando se busca reduzir a taxa de reação. Em geral, a forte turbulência criada recircula grande parte dos produtos, caracterizando por uma queima lenta.

A Figura 6.91 apresenta um comparativo da temperatura entre os modelos FRED, investigando a variação das constante A e B. Nota-se que tal modificação afetou o perfil de temperaturas, bem como o consumo de  $O_2$  e de formação de  $CO_2$ , mostrado respectivamente na Figura 6.92 e Figura 6.93. Isto está relacionado diretamente com o atraso no tempo de reação, tornando a curva de consumo de  $O_2$  menos acentuada.

A Figura 6.94 mostra um comparativo da formação de CO para o modelo FRED. Verifica-se que o perfil traçado pelo modelo após modificação foi descolado, embora o valor máximo obtido seja mais coerente.

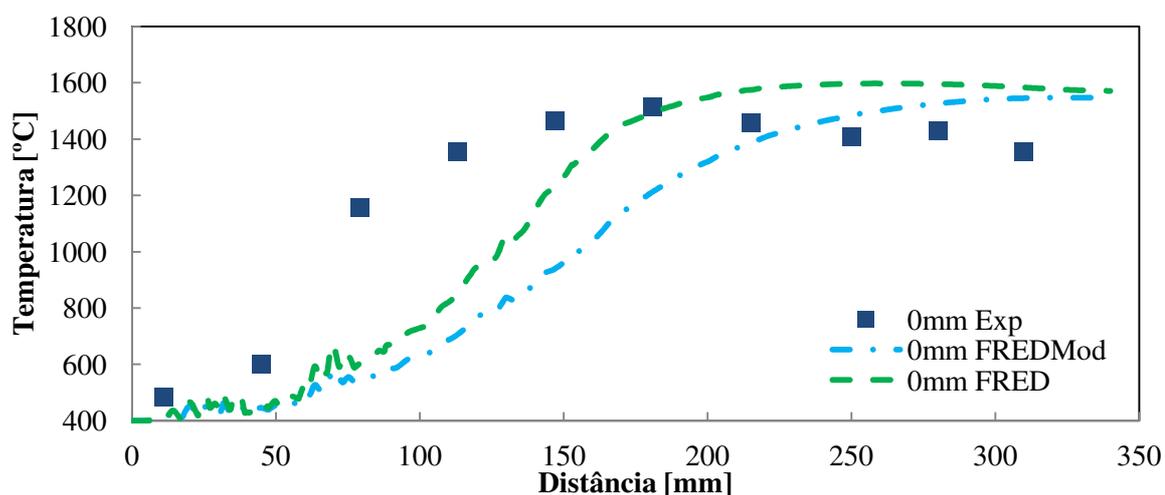


Figura 6.91 Comparativo da temperatura entre FREDMod *versus* FRED no eixo central.

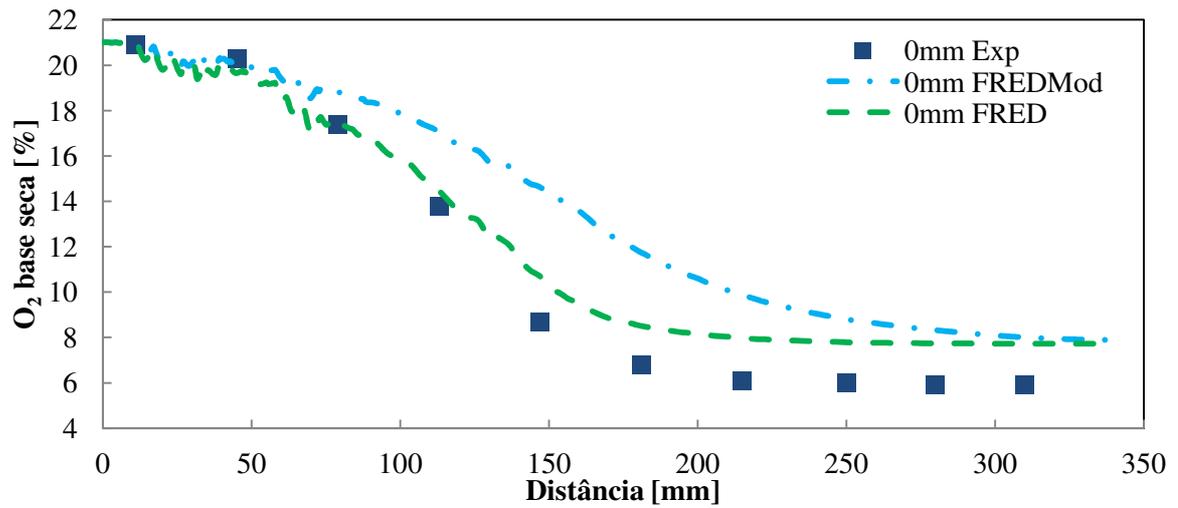


Figura 6.92 Comparativo de O<sub>2</sub> entre FREDMod *versus* FRED no eixo central.

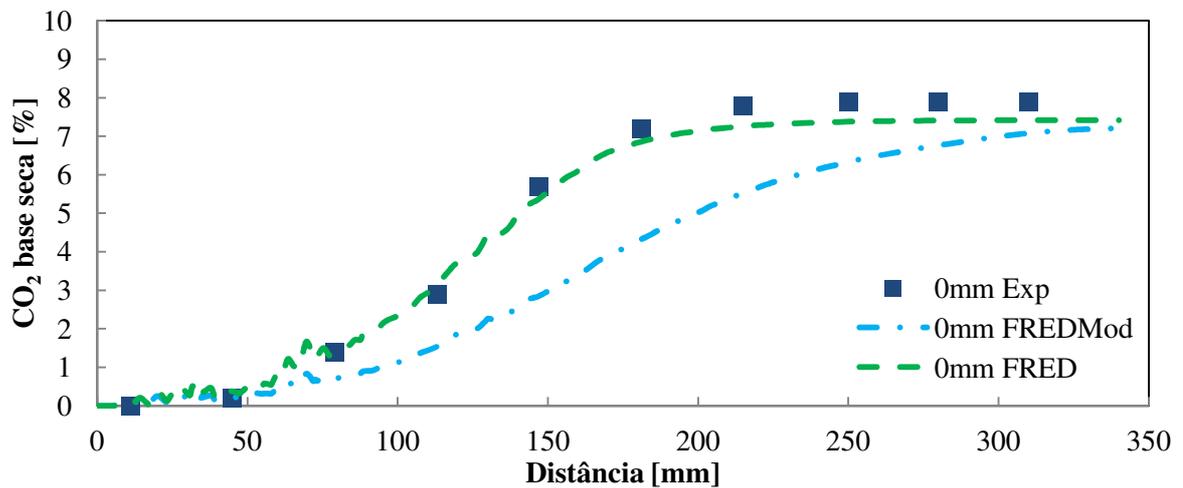


Figura 6.93 Comparativo de CO<sub>2</sub> entre FREDMod *versus* FRED no eixo central.

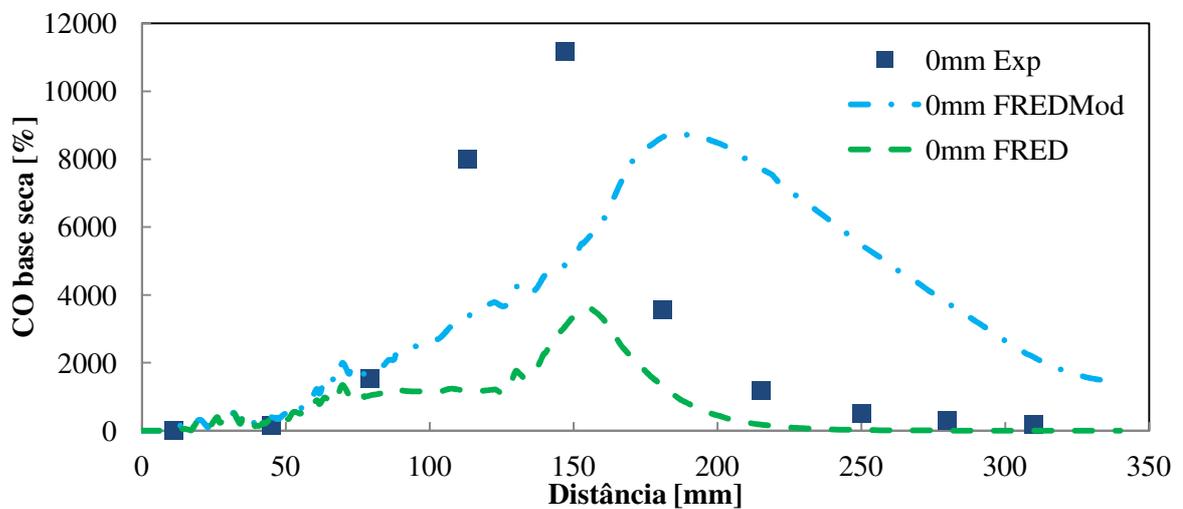


Figura 6.94 Comparativo de CO entre FREDMod *versus* FRED no eixo central.

Finalmente, a formação de  $\text{NO}_x$  é apresentada na Figura 6.95 para o modelo FRED após modificação das constantes. Nota-se que o perfil esteve em boa concordância com os dados experimentais disponíveis, mesmo empregando apenas duas etapas de reação, contrariamente ao resultado obtido com valores *default*, cujo valor máximo foi de 480ppm.

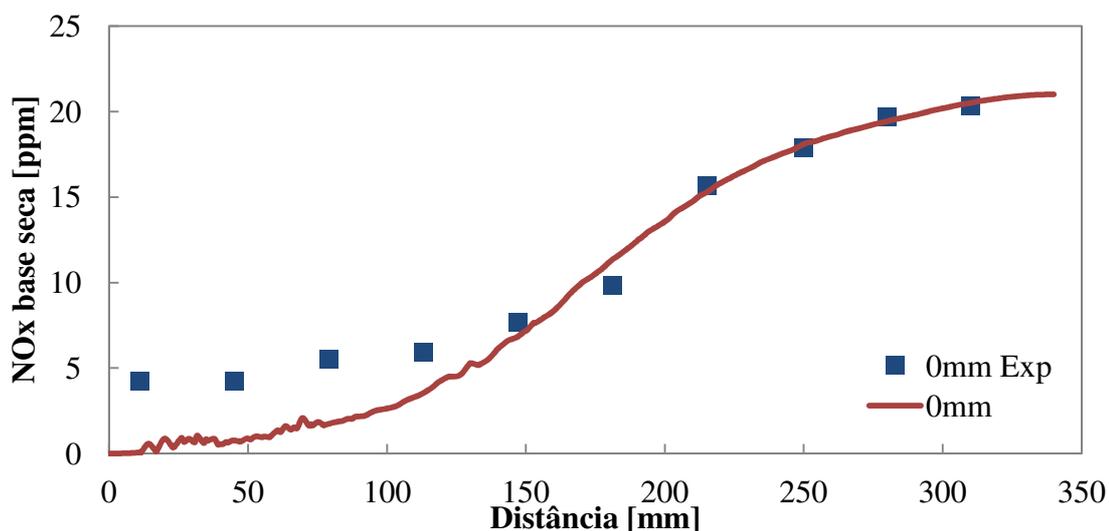


Figura 6.95 Distribuição de  $\text{NO}_x$  entre FREDMod *versus* FRED no eixo central.

Diante dos resultados obtidos, pode-se concluir que a investigação do valor das constantes matemáticas contidas nos modelos não devem ser ignoradas, sobretudo quando se emprega novos regimes de combustão, afim de se calibrar os resultados numéricos. Assim, na maioria dos casos, as possíveis divergências encontradas não correspondem apenas à deficiências do modelo numérico, mas sua correta aplicação e ajuste, melhorando ainda mais os resultados obtidos pela simulação CFD.

## Capítulo 7

# CONCLUSÕES

Foram investigados e discutidos os inúmeros conceitos disponíveis na literatura para obtenção do regime Sem Chama Visível, revelando uma tecnologia promissora de elevada eficiência e reduzida emissão de gases poluentes  $\text{NO}_x$ . Contudo, uma das principais dificuldades encontradas foi estabelecer um conceito claro e definido para este regime, em virtude das diversas abordagens disponíveis na literatura e pelo caráter inovador, que resulta normalmente nesta variedade de definições. Como exemplo, Wüning durante a descoberta da tecnologia, apresentou algumas características necessárias, como por exemplo, taxas de recirculação acima de 4,0 e elevado pré aquecimento do ar de combustão foram contestadas por alguns pesquisadores que conseguiram obter o regime com ligeiro pré aquecimento do ar de combustão, até mesmo na temperatura ambiente, além de taxas de recirculação diferentes daquelas determinadas pelo pesquisador. Segundo resultados de Veríssimo (2011), que serviu de base experimental para esta tese, o regime foi obtido com fator de recirculação menor.

Neste caso, pode-se concluir que não existe uma taxa de recirculação única, acima da qual pode-se afirmar que o regime de combustão é Sem Chama Visível, apenas que ela varia de acordo com a instalação e projeto do queimador. Logo, uma elevada temperatura do ar de combustão contribui para a estabilidade do processo da chama, porém não corresponde a um impedimento para obtenção do regime em temperaturas mais baixas do ar de combustão.

Quanto aos estudos numéricos, embora existam diferentes combinações de modelos numéricos empregados na modelagem do regime de combustão Sem Chama Visível, como pode ser identificado pela revisão bibliográfica, que o modelo de turbulência KER, de

radiação DO e de combustão EDC, com mecanismos de reação detalhados, são os mais indicados nesta modelagem. Contudo, tendo em vista a complexa turbulência criada no interior da câmara, foi avaliado inicialmente os modelos de turbulência, bem como as condições de entrada e hipóteses de simplificação, em termos de periodicidade e simetria. Foi identificado que a avaliação dos resultados de velocidade no eixo central para um setor de 1/16 era diferente daqueles obtidos considerando o domínio por completo. Porém, tendo em vista o uso de cinética detalhada, o tempo computacional torna-se um parâmetro importante. Neste caso, investigou-se a condição de simetria, como uma maneira de reduzir o tempo computacional, atingindo bons resultados em comparação ao domínio completo.

Na simulação do processo de combustão foram avaliados o modelo EDC com *1-step*, *2-step*, além de química detalhada com GRIMech3.0 e KEE58. Considerando os modelos globais, *1-step* e *2-step*, foram obtidos as maiores temperaturas em comparação aos dados experimentais disponíveis e as demais simulações realizadas, sobretudo com picos nos planos radiais próximos a região de injeção. Isto refletiu em valores também elevados para a formação de  $\text{NO}_x$ . Porém, com relação ao CO, os valores obtidos foram mínimos em comparação com os dados experimentais.

Em seguida, foi investigado o modelo EDC com química detalhada. Para a cinética GRIMech 3.0, contendo 53 espécies e 325 reações, o nível de detalhamento e de informações sobre concentrações de espécies reduziu o perfil de temperaturas radiais antes observado. Para a formação de CO, os níveis ficaram superiores aos experimentais, contrariamente aos resultados apresentados pela cinética *2-step*. Para a formação de  $\text{NO}_x$ , o detalhamento presente contribuiu para a redução do valor máximo obtido, chegando a valores mais coerentes. Contudo, o tempo computacional gasto superior as 380 horas de simulação, o que poderia inviabilizar futuras análises.

Neste contexto, foi investigado a cinética conhecida como KEE58, contendo 18 espécies e 58 reações intermediárias. Os resultados obtidos estiveram próximos daqueles com GRIMech3.0, apesar dos perfis de temperatura, de  $\text{O}_2$  e de  $\text{CO}_2$  apresentarem um pequeno afastamento, principalmente na metade da câmara. Em termos de CO, o perfil foi ligeiramente deslocado e os valores máximos permaneceram superiores ao GRIMech3.0. Contudo, analisando o tempo computacional gasto, cerca de 1/3 do anterior, as pequenas diferenças nos perfis de temperatura e espécies químicas traçados poderiam ser desconsideradas.

Diante dos resultados para KEE58, pode-se observar uma forte sensibilidade na modelagem de CO ao modelo de cinética, em comparação com o GRIMech3.0. Assim, em

razão dos valores apresentados permanecerem superiores aos experimentais, foi investigado a influência do parâmetro  $C_\tau$  do modelo EDC, relativo a escala de tempo, baseando no trabalho de Aminiam *et al.* (2012). A medida que se aumentou o valor deste parâmetro, os níveis de CO reduziram, atingindo o dado experimental máximo para  $C_\tau=3,0$ . Quanto aos níveis de NO<sub>x</sub>, a variação após mudança no parâmetro foi moderada.

Tendo em vista que o regime de combustão Sem Chama Visível é altamente distribuído, considerando as concentrações de O<sub>2</sub>, homogêneo no campo de temperatura, com elevada turbulência e reduzidas taxas de reação, isto o diferencia enormemente dos sistemas convencionais, o que exige a definição de um procedimento específico e de uma estratégia para modelagem numérica deste tipo de problema. Assim, este trabalho investigou o potencial da ferramenta CFD na combustão Sem Chama Visível, revelando que mesmo com uso dos modelos disponíveis no ANSYS Fluent®, aliado a química detalhada, ajustes nos parâmetros matemáticos são imprescindíveis, principalmente quando se investiga a formação de poluentes, CO e NO<sub>x</sub>.

Finalmente, de posse dos procedimentos, dos modelos numéricos e dos ajustes discutidos neste trabalho, a reprodução deste regime contribuirá ao desenvolvimento de novas aplicações e melhorias aos sistemas convencionais já existentes.

## 7.1 Trabalhos Futuros

Os trabalhos futuros a serem desenvolvidos com base neste trabalho serão:

1) Investigar outros parâmetros matemáticos envolvidos no programa ANSYS Fluent®, em especial ao modelo EDC, em termos de escala de comprimento,  $C_\xi$ .

2) Desenvolver uma rotina para modelagem de NO<sub>x</sub> específica para as características do regime de combustão Sem Chama Visível, afim de suprir possíveis deficiências presentes no ANSYS Fluent®, a ser incorporada ao programa.

3) Simular o regime de combustão Sem Chama Visível com modelagem LES, afim de considerar as flutuações das propriedades com o tempo. Neste caso, o teor de NO formado pode sofrer alterações em razão da forte sensibilidade da formação deste poluente com relação ao termo de flutuação da temperatura.

4) Investigar os resultados numéricos para o regime de combustão Sem Chama Visível com uso do modelo FRED modificando as constantes A e B para valores diferentes daqueles testados nesta tese.

5) Reproduzir numericamente este regime de combustão Sem Chama Visível com uso do modelo de turbulência SST.

## BIBLIOGRAFIA

- AMINIAN, J.; GALLETTI, C.; SHAHHOSSEINI, S.; TOGNOTTI, L. Numerical Investigation of a MILD Combustion Burner: Analysis of Mixing Field, Chemical Kinetics and Turbulence-Chemistry Interaction. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 88, n. 4, p. 597–623, 2012. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10494-012-9386-z>>. Acesso em: 23/5/2014.
- ANSYS INC. **ANSYS FLUENT Theory Guide Release 14.0**, 2011. Canonsburg, PA.
- AYOUB, M.; ROTTIER, C.; CARPENTIER, S.; et al. An experimental study of mild flameless combustion of methane/hydrogen mixtures. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 37, n. 8, p. 6912–6921, 2012. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319912000687>>. Acesso em: 22/5/2014.
- AZEVEDO, P. M. D. **Estudo Experimental e Numérico de um Queimador de Gás Natural**, 1999. 152 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- BAKKER, A. Lecture 10 - Turbulence Models, Applied Computational Fluid Dynamics. ,2002. Lecture.
- BATTAGLIA, V.; CRIPPA, F.; MALFA, E.; FANTUZZI, M. CFD for Flameless Burners Development. 31<sup>st</sup> Meeting on Combustion. **Anais...** p.1–6, 2008. Italy.
- BAUKAL, C. E. J. **Oxygen-Enhanced Combustion**. 2nd ed. London, New York: CRC Press, Taylor and Francis Group, 2013.
- BEER, J. M.; CHIGIER, N. A. **Combustion Aerodynamics**. London: Krieger Publishing Company, 1972.

- CAVALIERE, A.; JOANNON, M. DE. Mild Combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 30, n. 4, p. 329–366, 2004. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360128504000127>>. Acesso em: 5/5/2014.
- COELHO, P. J.; PETERS, N. Numerical simulation of a mild combustion burner. **Combustion and Flame**, v. 124, n. 3, p. 503–518, 2001.
- COLORADO, A. F.; HERRERA, B. A.; AMELL, A. A. Performance of a Flameless combustion furnace using biogas and natural gas. **Bioresource Technology**, v. 101, n. 7, p. 2443–2449, 2010. Elsevier Ltd. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/19944602>>. Acesso em: 6/5/2014.
- COUTO, C. A coisa mais importante nos próximos dez anos é conservar energia. Disponível em: <<http://epocanegocios.globo.com/Revista/Common/0,EMI280080-16381,00-A+COISA+MAIS+IMPORTANTE+NOS+PROXIMOS+DEZ+ANOS+E+CONSERVA R+ENERGIA.html>>. Acesso em: 1/12/2011.
- EDP. Conheça a origem da energia em 2012. Disponível em: <<https://energia.edp.pt/particularashome/apoio-ao-cliente/origem-da-energia/2012.aspx>>. Acesso em: 4/10/2013.
- EFFUGI, A.; GELOSA, D.; DERUDI, M. ‘Mild combustion of methane-derived fuel mixtures: natural gas and biogas. **Combustion Science and Technology**, v. 180, p. 481–493, 2008.
- FLAMME, M. New combustion systems for gas turbines (NGT). **Applied Thermal Engineering**, v. 24, n. 11-12, p. 1551–1559, 2004. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1359431103003685>>. Acesso em: 22/5/2014.
- FONTES, C. E.; BACCHI, R. D. A. Best Practice Guidelines for Combustion Modeling. 2010 Ansys South American Conference & ESSS Users Meeting. **Anais...** 2010. Atibaia, SP.
- FRASSOLDATI, A.; SHARMA, P.; CUOCI, A.; FARAVELLI, T.; RANZI, E. Kinetic and fluid dynamics modeling of methane/hydrogen jet flames in diluted coflow. **Applied Thermal Engineering**, v. 30, n. 4, p. 376–383, 2010. Elsevier Ltd. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1359431109002920>>. Acesso em: 22/5/2014.

- GALLETTI, C.; PARENTE, A.; TOGNOTTI, L. Numerical and experimental investigation of a mild combustion burner. **Combustion and Flame**, v. 151, n. 4, p. 649–664, 2007. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010218007001940>>. Acesso em: 12/5/2014.
- GLARBORG, P. NO<sub>x</sub> Chemistry in Pulse Combustion. Workshop in Pulsating Combustion and Its Applications, **Anais...**, 1993. Sweden: Lund Institute of Technology.
- GOMEZ-GARCÍA, M. A.; PITCHON, V.; KIENNEMANN, A. Pollution by nitrogen oxides : an approach to NO<sub>x</sub> abatement by using sorbing catalytic materials. **Environment International**, v. 31, p. 445–467, 2005.
- GONÇALVES, N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas**, 2007. 71 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Matemática) - Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.
- GRAÇA, M. C. **Computational Investigation of a Reversed-Flow Small Scale Combustor**, 2012. 63 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- KULKARNI, R. M.; POLIFKE, W. LES of Delft-Jet-In-Hot-Coflow (DJHC) with tabulated chemistry and stochastic fields combustion model. **Fuel Processing Technology**, v. 107, p. 138–146, 2012. Disponível em: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378382012002275>>. Acesso em: 7/5/2014.
- LACAVALA, P. T. **Investigação Experimental do Enriquecimento do Ar na Incineração de Resíduos Aquosos**, 2000. São José dos Campos, SP: 283 f. Tese (Doutorado em Engenharia Aeronáutica e Mecânica) - Instituto Tecnológico de Aeronáutica.
- LACAVALA, P. T. O Estado da Arte em Tecnologias de Combustão na Indústria. ,2009. São José dos Campos, SP: 6º Congresso Brasileiro sobre Eficiência Energética - ExpoEficiência.
- LEICHER, J.; GIESE, A. Reduce NO<sub>x</sub> Emissions in Glass Melting Furnaces. The 25th International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems. **Anais...**, 2012. Perugia, Italy: ECOS.
- LUPANT, D.; PESENTI, B.; LYBAERT, P. Detailed characterization of flameless oxidation on a laboratory scale furnace. Proceedings of the European Combustion Meeting 2007. **Anais...** p.6, 2007. Mons, Belgium: ECM.

- MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H. On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. 16th Symp International on Combustion. **Anais...** p.719–729, 1976. Pittsburg, Pennsylvania.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica de Fluidos Computacional**. : Livros Técnicos e Científicos- LTC, 1995.
- MANCINI, M.; SCHWOPPE, P.; WEBER, R.; ORSINO, S. On mathematical modelling of flameless combustion. **Combustion and Flame**, v. 150, n. 1-2, p. 54–59, 2007. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010218007000739>>. Acesso em: 22/5/2014.
- MARQUES, A. C. **Desenvolvimento de Modelo Numérico Utilizando o Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas**, 2005. 95 f. Dissertação (Mestrado Em Engenharia Ambiental) - Universidade Federal do Espírito Santo.
- MARTINS, C. A.; FERREIRA, M. A. Considerações Sobre a Formação de NOx na Combustão. VI Congresso Nacional de Engenharia Mecânica - CONEM. **Anais...** , 2010. Campina Grande, Paraíba: ABCM.
- MASSON, E. **Etude Experimentale des Champs Dynamiques et Scalaires de la Combustion Sans Flamme**, 2005. Rouen, France: PhD Thesis, Institut National des Sciences Appliquees de Rouen- INSA.
- MI, J.; LI, P.; DALLY, B. B.; CRAIG, R. A. Importance of Initial Momentum Rate and Air-Fuel Premixing on Moderate or Intense Low Oxygen Dilution (MILD) Combustion in a Recuperative Furnace. **Energy & Fuels**, v. 23, n. 11, p. 5349–5356, 2009. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ef900866v>>. Acesso em: 22/5/2014.
- MINAMOTO, Y.; SWAMINATHAN, N. Scalar gradient behaviour in MILD combustion. **Combustion and Flame**, v. 161, n. 4, p. 1063–1075, 2014. The Combustion Institute. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010218013003799>>. Acesso em: 12/5/2014.
- MOHAMED, H.; HMAEID, B. Influence of turbulent mixing intensity on the MILD combustion and the pollutant formation. **Internation Journal of Energy and Environmental Engineering**, v. 3, n. 22, p. 2–7, 2012.

- MURER, S.; PESENTI, B.; LYBAERT, P. Characterization of flameless combustion of natural gas in a laboratory scale furnace. European Combustion Meeting. **Anais...** p.1–6, 2005. Louvain-la-Neuve, Belgique: ECM.
- MYERS, G. E. **Analytical Methods in Conduction Heat Transfer**. 2nd ed. Amch, 1998.
- ORSINO, S.; WEBER\*, R.; BOLLETTINI, U. Numerical Simulation of Combustion of Natural Gas with High-Temperature Air. **Combustion Science and Technology**, v. 170, n. 1, p. 1–34, 2001 Disponível em:  
<<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00102200108907848>>.  
Acesso em: 30/4/2014.
- POINSOT, T.; VEYNANTE, D.; NICOUD, F.; et al. Simulation tools for 3D reacting flows. ,2013. .: Combustion Energy Frontier Research Center, Princeton University.
- POPE, S. B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. **Combustion Theory Modeling**, v. 1, p. 41–63, 1997.
- QUARESMA, P. M. R. **Efeito da Composição do Combustível no Desempenho de uma Câmara de Combustão com Baixas Emissões de NO x para Aplicação a Turbinas a Gás**, 2010. Lisboa, Portugal: 74 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- RAFIDI, N. E. **Thermodynamic aspects and heat transfer characteristics of HiTAC furnaces with regenerators**, 2005. Stockholm, Sweden: PhD Thesis, Department Of Materials Science and Engineering, Royal Institute of Technology.
- SALVADOR, N. M. C. **Simulação de Grandes Escalas para Chamas Reativas Não Premisturadas com Química Detalhada**, 2012. São José dos Campos, SP: Tese de Doutorado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE. Disponível em:  
<<http://urlib.net/8JMKD3MGP7W/3DFEJDS>>. .
- SKALSKA, K.; MILLER, J. S.; LEDAKOWICZ, S. Science of the Total Environment Trends in NO<sub>x</sub> abatement : A review. **Science of the Total Environment**, v. 408, n. 19, p. 3976–3989, 2010. Elsevier B.V. Disponível em:  
<<http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2010.06.001>>. .
- SMITH, G. P.; GOLDEN, D. M.; FRENKLACH, M.; et al. GRIMech 3.0. Disponível em:  
<[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>. Acesso em: 6/1/2014.

- SMITH, T. F.; SHEN, Z. F.; FRIEDMAN, J. N. Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model. **Journal of Heat Transfer**, v. 104, n. 4, p. 602, 1982. Disponível em: <<http://heattransfer.asmedigitalcollection.asme.org/article.aspx?articleid=1437794>>. Acesso em: 22/5/2014.
- SPODE, C. **Simulação de Grandes Escalas e Simulação Híbrida RANS/LES do escoamento sobre o Degrau com Condições de Contorno Turbulentas**, 2006. 71 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia.
- SZEGÖ, G. G. **Experimental and Numerical Investigation of a Parallel Jet MILD Combustion Burner System in a Laboratory-scale Furnace**, 2010. Australia: PhD Thesis, School of Mechanical Engineering Faculty of Engineering, Mathematical and Computer Science, University of Adelaide.
- URNS, S. R. **An Introduction to Combustion - Concepts and Applications**. 2nd editio ed. USA: McGraw-Hill, 2000.
- VERÍSSIMO, A. S. **Estudo Experimental de uma Câmara de Combustão Operando no Regime de Combustão sem Chama Visível**, 2011. 131 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa.
- VERÍSSIMO, A. S.; ROCHA, A. M. A.; COSTA, M. Flow , Combustion and Emission Characteristics of a Laboratory Combustor. 16th Int Symp on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics. **Anais...** p.1–10, 2012. Lisbon, Portugal.
- VEYNANTE, D.; VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 28, p. 193–166, 2002.
- VILLERMAUX, C.; PORCHERON, L.; RICHARD, N.; et al. GDF SUEZ Activities on Flameless Combustion: From Physical Phenomena Analysis to Industrial-Scale Applications. International Gas Union Research Conference. **Anais...** p.19, 2008. Paris: IGRC.
- WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. CHEMICAL KINETIC MODELING OF HYDROCARBON COMBUSTION. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 10, p. 1–57, 1984.

- WÜNNING, J. A.; WÜNNING, J. G. Flameless Oxidation to Reduce NO-Formation. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 23, p. 81–94, 1997.
- WÜNNING, J. G. Flameless Combustion in the Thermal Process Technology. 2nd International Seminar High Temperature Air Combustion. **Anais...** p.11, 2000. Stockholm, Sweden: Royal Institute of Technology, Division of Metallurgy.
- WÜNNING, J. G. FLOX® – Flameless Combustion. ,2003. Düsseldorf: ThermProcess Symposium, Verband Deutscher Maschine und Anlagenabu e. V. (VDMA).
- WÜNNING, J. G. Flameless Oxidation. 6th HiTACG Symposium. **Anais...** p.13, 2005. Essen, Germany: Gaswarme Institut.
- YU, H. **Flameless Combustion of Natural Gas in the SJ/WJ Furnace**, 2008. Kingston, Ontario, Canada: PhD Thesis, Department of Mechanical and Materials Engineering, Queen's University.

## **Anexo A**

### **Biblioteca de reações Chemkin KEE58**

### BIBLIOTECA REAÇÕES KEE58

\*\*\*\*\*  
 \* FLUENT/CHEMKIN-CFD Release 20091 \*  
 \* CHEM Application \*  
 \* GAS-PHASE MECHANISM INTERPRETER \*  
 \* Copyright(c) 1997-2009 Reaction Design. All Rights Reserved. \*  
 \*\*\*\*\*

ELEMENTS CONSIDERED		ATOMIC WEIGHT
1.	O	159.994
2.	H	100.797
3.	C	120.112
4.	N	140.067

SPECIES CONSIDERED	MOLECULAR WEIGHT		TEMPERATURE		ELEMENTS			
			LOW	HIGH	O	H	C	N
1.	CH3	1.50E+05	300	5000	3	0	1	0
2.	CH4	1.60E+05	300	5000	4	0	1	0
3.	H	1.01E+04	300	5000	1	0	0	0
4.	O	1.60E+05	300	5000	0	1	0	0
5.	O2	3.20E+05	300	5000	0	2	0	0
6.	H2	2.02E+04	300	5000	2	0	0	0
7.	OH	1.70E+05	300	5000	1	1	0	0
8.	HO2	3,30E+05	300	5000	1	2	0	0
9.	H2O	1.80E+05	300	5000	2	1	0	0
10.	HCO	2.90E+05	300	5000	1	1	1	0
11.	CH2	1.40E+05	250	4000	2	0	1	0
12.	CH	1.30E+05	300	5000	1	0	1	0
13.	CO	2.80E+05	300	5000	0	1	1	0
14.	CO2	4.40E+05	300	5000	0	2	1	0
15.	CH2O	3.00E+05	300	5000	2	1	1	0
16.	H2O2	3.40E+05	300	5000	2	2	0	0
17.	N	1.40E+05	300	5000	0	0	0	1
18.	N2	2.80E+05	300	5000	0	0	0	2

$$k = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

REACTIONS CONSIDERED		A	b	E
1.	CH <sub>3</sub> +H(+M)=CH <sub>4</sub> (+M)	6.00E+16	-1.0	0.0
	Low pressure limit:	0.80E+27	-0.30E+01	0.0E+0
2.	CH <sub>4</sub> +O <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> +HO <sub>2</sub>	7.90E+13	0.0	28181.0
3.	CH <sub>4</sub> +H=CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub>	2.20E+04	3.0	4403.0
4.	CH <sub>4</sub> +O=CH <sub>3</sub> +OH	1.60E+06	2.4	3724.0
5.	CH <sub>4</sub> +OH=CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O	1.60E+06	2.1	1238.0
6.	CH <sub>3</sub> +O=CH <sub>2</sub> O+H	6.80E+13	0.0	0.0
7.	CH <sub>3</sub> +OH=CH <sub>2</sub> O+H <sub>2</sub>	1.00E+12	0.0	0.0
8.	CH <sub>3</sub> +OH=CH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	1.50E+13	0.0	2516.0
9.	CH <sub>3</sub> +H=CH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	9.00E+13	0.0	7599.0
10.	CH <sub>2</sub> +H=CH+H <sub>2</sub>	1.40E+19	-2.0	0.0
11.	CH <sub>2</sub> +OH=CH <sub>2</sub> O+H	2.50E+13	0.0	0.0
12.	CH <sub>2</sub> +OH=CH+H <sub>2</sub> O	4.50E+13	0.0	1510.0
13.	CH+O <sub>2</sub> =HCO+O	3.30E+13	0.0	0.0
14.	CH+O=CO+H	5.70E+13	0.0	0.0
15.	CH+OH=HCO+H	3.00E+13	0.0	0.0
16.	CH+CO <sub>2</sub> =HCO+CO	3.40E+12	0.0	347.0
17.	CH <sub>2</sub> +CO <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub> O+CO	1.10E+11	0.0	503.0
18.	CH <sub>2</sub> +O=CO+2H	3.00E+13	0.0	0.0
19.	CH <sub>2</sub> +O=CO+H <sub>2</sub>	5.00E+13	0.0	0.0
20.	CH <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =CO <sub>2</sub> +2H	1.60E+12	0.0	503.0
21.	CH <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub> O+O	5.00E+13	0.0	4529.0
22.	CH <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =CO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	6.90E+11	0.0	252.0
23.	CH <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =CO+H <sub>2</sub> O	1.90E+10	0.0	-503.0
24.	CH <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =CO+OH+H	8.60E+10	0.0	-252.0
25.	CH <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =HCO+OH	4.30E+10	0.0	-252.0
26.	CH <sub>2</sub> O+OH=HCO+H <sub>2</sub> O	3.43E+09	1.2	-225.0
27.	CH <sub>2</sub> O+H=HCO+H <sub>2</sub>	2.19E+08	1.8	1510.0
28.	CH <sub>2</sub> O+M=HCO+H+M	3.31E+16	0.0	40762.0
29.	CH <sub>2</sub> O+O=HCO+OH	1.81E+13	0.0	1551.0
30.	HCO+OH=CO+H <sub>2</sub> O	5.00E+12	0.0	0.0
31.	HCO+M=CO+H+M	1.60E+14	0.0	7397.0
32.	HCO+H=CO+H <sub>2</sub>	4.00E+13	0.0	0.0
33.	HCO+O=CO <sub>2</sub> +H	1.00E+13	0.0	0.0
34.	HCO+O <sub>2</sub> =CO+HO <sub>2</sub>	3.30E+13	-0.4	0.0
35.	CO+O+M=CO <sub>2</sub> +M	3.20E+13	0.0	-2114.0
36.	CO+OH=CO <sub>2</sub> +H	1.51E+07	1.3	-381.0
37.	CO+O <sub>2</sub> =CO <sub>2</sub> +O	1.60E+13	0.0	20632.0
38.	CO+HO <sub>2</sub> =CO <sub>2</sub> +OH	5.80E+13	0.0	11541.0
39.	H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =2OH	1.70E+13	0.0	24044.0
40.	OH+H <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O+H	1.17E+09	1.3	1825.0
41.	H+O <sub>2</sub> =OH+O	5.13E+16	-0.8	8307.0

42.	$O+H_2=OH+H$	1.80E+10	1.0	4442.0
43.	$H+O_2+M=HO_2+M$	3.61E+17	-0.7	0.0
		H2O Enhanced	by	1.86E+04
		H2 Enhanced	by	2.86E+03
		N2 Enhanced	by	1.26E+03
		CO Enhanced	by	2.11E+03
		CO2 Enhanced	by	4.20E+03
44.	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	7.50E+12	0.0	0.0
45.	$H+HO_2=2OH$	1.40E+14	0.0	540.0
46.	$O+HO_2=O_2+OH$	1.40E+13	0.0	540.0
47.	$2OH=O+H_2O$	6.00E+08	1.3	0.0
48.	$2H+M=H_2+M$	1.00E+18	-1.0	0.0
49.	$2H+H_2=2H_2$	9.20E+16	-0.6	0.0
50.	$2H+H_2O=H_2+H_2O$	6.00E+19	-1.2	0.0
51.	$2H+CO_2=H_2+CO_2$	5.49E+20	-2.0	0.0
52.	$H+OH+M=H_2O+M$	1.60E+22	-2.0	0.0
		H2O Enhanced	by	5.00E+03
53.	$H+O+M=OH+M$	6.20E+16	-0.6	0.0
		H2O Enhanced	by	5.00E+03
54.	$H+HO_2=H_2+O_2$	1.25E+13	0.0	0.0
55.	$2HO_2=H_2O_2+O_2$	2.00E+12	0.0	0.0
56.	$H_2O_2+M=2OH+M$	1.30E+17	0.0	22897.0
57.	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	1.60E+12	0.0	1912.0
58.	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	1.00E+13	0.0	906.0