



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

TESE DE DOUTORADO

**Simulação Numérica em CFD do Regime de
Combustão Sem Chama Aplicado a Queima de
Etanol Hidratado.**

Autor: **Bruna Oliveira Passos e Silva Siqueira**

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

Co-orientador: **Prof. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues**

Itajubá, Junho de 2016

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

Bruna Oliveira Passos e Silva Siqueira

**Simulação Numérica em CFD do Regime de
Combustão Sem Chama Aplicado a Queima de
Etanol Hidratado.**

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

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

Orientador: **Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento**
Co-orientadora: **Prof. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues**

Itajubá, Junho de 2016
MG – Brasil

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

Bruna Oliveira Passos e Silva Siqueira

**Simulação Numérica em CFD do Regime de
Combustão Sem Chama Aplicado a Queima de
Etanol Hidratado.**

Tese aprovada por banca examinadora em 13 de junho de 2016,
conferindo à autora o título de *Doutora em Ciências em
Engenharia Mecânica.*

Banca Examinadora:

Prof. Dr. João Andrade de Carvalho Junior

Prof. Dr. Pedro Teixeira Lacava

Prof. Dr. Christian Jeremi Rodriguez Coronado

Prof. Dra. Lucilene de Oliveira Rodrigues (Co-orientadora)

Prof. Dr. Marco Antônio Rosa do Nascimento (Orientador)

Itajubá, Junho de 2016
MG – Brasil

Dedicatória

Dedico este trabalho ao meu marido Hélio e ao meu filho Miguel que suportaram toda esta caminhada ao meu lado, me fortalecendo e ajudando em todos os momentos, bem como aos meus pais e irmãos.

Agradecimentos

Em primeiro lugar agradeço a Deus por me dar forças e iluminar minha vida durante a caminhada desafiadora do doutorado, pois sem Ele não teria concluído meu trabalho.

Agradeço ao meu orientador professor Marco Antônio pela orientação, paciência e por contribuir significativamente para o desenvolvimento desta tese. Agradeço também pela confiança em mim depositada e por me auxiliar durante todo o tempo de realização deste trabalho.

Meus agradecimentos à professora Lucilene por me ensinar a utilizar a ferramenta numérica ANSYS CFD, pelas discussões muito produtivas que me ajudaram no desenvolvimento das simulações numéricas e na análise de resultados e também por me fornecer seu computador para realizar as simulações.

Agradeço a professora Cláudia Gonçalves de Azevedo por disponibilizar os resultados experimentais e por me ajudar com minhas dúvidas para o desenvolvimento desta tese.

Aos professores Luiz Antonio (UNIFEI) e Alex Mendonça Bimbato (FEG/UNESP) pela orientação inicial no Doutorado e por me ensinarem conceitos sobre mecânica dos fluidos e turbulência, fundamentais ao desenvolvimento da minha tese

Agradeço meu marido Hélio por me apoiar e ajudar em todos os momentos e ao meu filho Miguel por suportar minha ausência e por alegrar minha vida me dando motivação para continuar na luta a cada dia.

Aos meu pais por ficarem ao meu lado e não me deixarem desistir do meu sonho.

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

Por fim agradeço à CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro fornecido durante o período de desenvolvimento deste trabalho.

"Querem que vos ensine o modo de chegar à ciência verdadeira? Aquilo que se sabe, saber que se sabe; aquilo que não se sabe, saber que não se sabe. Na verdade é este o saber."

Confúcio

RESUMO

SILVA SIQUEIRA, B. O. P. (2015), *Simulação Numérica em CFD do Regime de Combustão Sem Chama Aplicado a Queima de Etanol Hidratado*. Itajubá, 108p. Tese de Doutorado, Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

A combustão sem chama tem chamado a atenção de pesquisadores da área de geração de energia por promover redução na emissão de poluentes como NO_x e CO e pela melhora na performance dos combustores. Estudos recentes tem aliado esta tecnologia à utilização de biocombustíveis e os resultados se mostram bastante promissores. Sendo assim o presente trabalho tem por objetivo analisar numericamente a combustão sem chama de sprays turbulentos de etanol hidratado através da ferramenta ANSYS CFX com base em resultados experimentais relativos à caracterização de um sistema compacto que opera neste regime de combustão. Nas simulações foram empregados os modelos de turbulência *RNG k- ϵ* , o modelo de combustão FRC/EDC, de radiação DT, modelagem de spray de combustível pelo DPM e mecanismo de reação com 70 reações e 26 espécies principais para o etanol. Os resultados analisados foram a distribuição e os gradientes de temperatura no interior da câmara de combustão, a composição dos gases na exaustão da câmara e a influência da variação do coeficiente de excesso de ar no regime de combustão sem chama. Os resultados numéricos mostraram uma distribuição de temperatura relativamente uniforme no interior da câmara com baixos gradientes de temperaturas. Os níveis de emissões de poluentes (CO_2 , CO, NO_x e UHC) também foram baixos, diminuindo significativamente com o aumento do coeficiente de excesso de ar. De forma geral os resultados numéricos apresentaram boa concordância com os dados experimentais disponíveis para comparação permitindo a validação da modelagem desenvolvida na presente tese e também a caracterização do regime de combustão sem chama.

Palavras-chave: combustão sem chama; *flameless*; ANSYS CFX; sprays turbulentos.

ABSTRACT

SILVA SIQUEIRA, B. O. P. (2015), *CFD Numerical Simulation of the Flameless Combustion Regime Applied to the Burning of Hydrous Ethanol*. Itajubá, 108p. PhD Thesis, Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Flameless combustion has attracted the attention of researchers from the power generation area by promoting a reduction in the emission of pollutants such as NO_x and CO and by the improved performance of the combustor. Recent studies have combined this technology with the use of biofuels and the results have been quite promising. Thus the present study aims to analyze numerically the flameless combustion of turbulent sprays of hydrous ethanol by ANSYS CFX tool based on the experimental results about the characterization of a compact system that operates at this combustion regime. In the simulations were used the RNG k- ϵ turbulence model, the combustion model FRC/EDC, DT radiation model, fuel spray modeling by DPM and reaction mechanism with 70 reactions and 26 major species for ethanol. The analyzed results were the distribution and temperature gradients within the combustor, the composition of the exhaust gases in the chamber and the influence of the variation of the excess air coefficient in the flameless combustion regime. The numerical results showed a relatively uniform temperature distribution within the chamber and very low temperature gradients. Pollutant emissions levels (CO₂, CO, NO_x e UHC) were also quite low decreasing significantly with increasing of excess air coefficient. The numerical values obtained showed good agreement with the experimental results, allowing the validation of the numerical modeling developed in this thesis and also the characterization of the flameless combustion regime.

Key-words: *flameless combustion regime; flameless; ANSYS CFX; tubulent sprays.*

Sumário

RESUMO	vii
ABSTRACT	viii
SUMÁRIO.....	ix
LISTA DE FIGURAS	xi
LISTA DE TABELAS	xv
SIMBOLOGIA	xvi
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Motivações.....	1
1.2. Objetivos.....	3
1.3. Estrutura do Trabalho	4
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1. Regime de Combustão Sem Chama.....	6
2.1.1. Conceito de Combustão Sem Chama	6
2.1.2. Abordagem Experimental Para Combustíveis Gasosos	7
2.1.3. Abordagem Experimental Para Combustíveis Líquidos.....	17
2.1.4. Abordagem Numérica Para Combustíveis Gasosos	24
2.1.5. Abordagem Numérica Para Combustíveis Líquidos	31
3. MÉTODO DE SOLUÇÃO: DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL.....	39
3.1. Equações Governantes do Problema.....	40
3.2. Modelagem da Turbulência	41
3.2.1. Equações Médias de Reynolds (RANS)	42
3.3. Modelos de Turbulência	43
3.3.1. Modelos a Zero Equações de Transporte.....	44
3.3.2. Modelos a Uma Equação de Transporte	45
3.3.3. Modelos a Duas Equações de Transporte	45
3.3.4. Modelos das Tensões de Reynolds (RSM – Reynolds Stress Model).....	47
3.4. Modelagem da Combustão	48
3.4.1. Eddy Dissipation Concept (EDC).....	49
3.4.2. Modelo Finite Rate Chemistry (FRC)	49
3.4.3. Modelo Combinado Finite Rate Chemistry/ Eddy Dissipation Concept.....	50
3.5. Modelagem de Sprays Turbulentos	50
3.5.1. Modelo de Fases Discretas (DPM)	51

3.5.2. Atomização	53
3.5.3. Evaporação	55
3.5.4. Dispersão Turbulenta	56
3.5.5. Acoplamento Entre Fases	57
3.6. Mecanismos de Reação para o Etanol	58
4. ANÁLISE DE RESULTADOS	61
4.1. Estudo do Processo de Combustão	64
4.1.1. Condições iniciais para desenvolvimento das simulações numéricas	64
4.1.2. Validação da modelagem numérica da turbulência e da combustão	65
4.1.2.1 – Simulação 1: k-ε standard/EDC/DT	65
4.1.2.2 – Simulação 2: k-ε standard/FRC/DT	68
4.1.2.3 – Simulação 3: k-ε standard/FRC/EDC/DT	71
4.1.2.4 – Simulação 4: RNG k-ε/FRC/DT	72
4.1.2.5 – Simulação 5: RNG/FRC/EDC/DT	74
4.2. Modelagem do Spray de Etanol Hidratado	76
4.3. Resultados Numéricos e Discussões	78
4.3.1 – Distribuição de Temperatura no Interior da Câmara de Combustão	78
4.3.1.1 – TESTE 1	79
4.3.1.2 – TESTE 2	81
4.3.1.3 – TESTE 3	83
4.3.1.4 – TESTE 4	85
4.3.1.5 – TESTE 5	87
4.3.1.6 – TESTE 6	89
4.3.1.7 – TESTE 7	91
4.3.1.8 – TESTE 8	93
4.3.2 – Análise da Composição dos Gases na Exaustão da Câmara	94
5. CONCLUSÕES	99
5.1. Trabalhos Futuros	102
REFERÊNCIAS	103
ANEXO A - Mecanismos de Formação de CO e de NO _x	107

Lista de Figuras

Figura 2.1 – Regimes de combustão: (a) convencional e (b) Regime de Combustão sem Chama obtidos nos experimentos realizados por Wüning & Wüning (1997).....	8
Figura 2.2 – Processo idealizado do Regime de Combustão sem Chama. Wüning & Wüning (1997).	9
Figura 2.3 – Diagrama de limites de estabilidade para diferentes modos de combustão. Wüning & Wüning (1997).	11
Figura 2.4 – Comportamento da chama na reação de combustão com ar pré-aquecido a 1100°C e concentração de oxigênio, O ₂ , em (a) 21%, (b) 8% e (c) 2%. Gupta (2000).	12
Figura 2.5 – Chamas de metano com ar de combustão pré-aquecido a 1000 °C e concentração de oxigênio, O ₂ , em (a) 21%, (b) 8% e (c) 2%. Gupta (2000).	13
Figura 2.6 - Configurações para injeção de ar e combustível na câmara de combustão. Arghode& Gupta (2010).	15
Figura 2.7 - Comportamento da chama para as quatro configurações com a variação da razão de equivalência (ϕ). Arghode & Gupta (2010).	15
Figura 2.8 – Imagens da distribuição do radical hidroxila (OH) no interior da câmara de combustão em função do coeficiente de excesso de ar. 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).	16
Figura 2.9 – Comparação entre os resultados numérico e experimental para o regime de combustão sem chama visível. Reproduzida de Torresi (2010).	18
Figura 2.10 – Faixas de operação da câmara de combustão no regime de combustão sem chama visível para os diferentes tipos de combustíveis utilizados. Derudi & Rota (2011). ...	19
Figura 2.11 - Taxa de emissão de poluentes para diferentes razões de equivalência, potência de operação e coeficiente de excesso de ar. Derudi & Rota (2011).	20
Figura 2.12–Perfil de aquecimento da câmara de combustão durante o experimento. Reproduzido de Azevedo (2013).	21
Figura 2.13 – Distribuição de temperatura para a) $\lambda = 1,65$; b) $\lambda = 2,05$; c) $\lambda = 2,26$; d) $\lambda = 2,45$ com a câmara de combustão operando a 2 kW. Azevedo (2013).	22

Figura 2.14 – Distribuição de temperatura para a) $\lambda = 1,21$; b) $\lambda = 1,41$; c) $\lambda = 1,61$; d) $\lambda = 1,80$ com a câmara de combustão operando a 4 kW. Azevedo (2013).....	23
Figura 2.15 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos da distribuição de temperatura para o regime de combustão sem chama visível. Adaptada de Wüning (2005).	24
Figura 2.16 – Concentração de CO ao longo do comprimento da câmara de combustão. Yang & Blasiak (2005).	26
Figura 2.17 – Concentração de NO para diferentes razões de excesso de ar. Yang & Blasiak (2005).	26
Figura 2.18 - Distribuição de temperatura e concentração de CO obtidos na simulação numérica utilizando o modelo de turbulência k- ϵ e o modelo de combustão EDM. Murer et al., (2005).	27
Figura 2.19 - Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para a queima de mistura metano-hidrogênio. (a) EDC/FRC com mecanismo de reação global, (b) EDC com mecanismo de reação global, (c) EDC com DRM-19 e (d) EDC com GRI-3.0. Parente et al., (2008).	29
Figura 2.20 – Emissões de NO _x e máxima temperatura de chama em função da temperatura de injeção de combustível. Khoshal et al., (2011).	30
Figura 2.21 – Relação entre as posições radial, axial e o ângulo α . Jamali (2014).	34
Figura 2.22 – Distribuição de velocidade axial da fase gasosa para o modelo <i>steady flamelet</i> . (° - Experimento; -- RSM; - - k- ϵ standard; - - k- ϵ realizável). Jamali (2014).	35
Figura 2.23 – Distribuição de velocidade radial da fase gasosa para o modelo <i>steady flamelet</i> . (° - Experimento; - - RSM; - - k- ϵ standard; - - k- ϵ realizável). Jamali (2014).	35
Figura 2.24 – Distribuição de velocidade axial da fase gasosa para o modelo <i>steady flamelet</i> . (° - Experimento; - - RSM; - - k- ϵ standard; - - k- ϵ realizável). Jamali (2014).	36
Figura 2.25 - Perfis de temperatura para o modelo de combustão FGM. (° - Experimento; -- RSM; - - k- ϵ standard; - - k- ϵ realizável). Jamali (2014).	37
Figura 2.26 – Concentração de radicais OH na chama para os seguintes modelos: (a) FGM e (b) <i>Steady Flamelet</i> . Adaptada de Jamali (2014).	38
Figura 3.1 – Modelos de combustão disponíveis no ANSYS (ANSYS INC., 2011).	48
Figura 3.2 – Representação dos regimes de escoamento e da atomização em sprays. Adaptada de Jenny et al., 2012.	53
Fig. 4.1 – Representação da geometria da câmara de combustão.	62
Figura 4.2 – Malha utilizada nas simulações numéricas.	63
Figura 4.3 – Malha para medição de temperatura experimental de Azevedo (2013).....	63
Figura 4.4 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos k- ϵ /EDC/DT.	66

Figura 4.5 – Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para os modelos k-ε standard/EDC/DT.	67
Figura 4.6 – Campo de velocidades gerado no interior da câmara de combustão para os modelos k-ε/EDC/DT.	68
Figura 4.7 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos k-ε/FRC/DT.....	69
Figura 4.8 – Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para os modelos k-ε standard/FRC/DT.	70
Figura 4.9 - Campo de velocidades gerado no interior da câmara de combustão para os modelos k-ε/FRC/DT.	70
Figura 4.10 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos k-ε/FRC_ED/DT.....	71
Figura 4.11 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos RNG k-ε/FRC/DT.	73
Figura 4.12 - Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para os modelos RNG k-ε/FRC/DT.	74
Figura 4.13 - Campo de velocidades gerado no interior da câmara de combustão para os modelos RNG k-ε/FRC/DT.	74
Figura 4.14 – Comparação entre os resultados numéricos para os modelos de combustão FRC e FRC/EDC.....	76
Figura 4.15 – Comparação entre o spray formado para os modelos de turbulência: (a) k-ε e (b) RNG k-ε.	77
Figura 4.16 - Distribuição de temperatura para $\lambda = 1,65$ com a câmara de combustão operando a 2 kW (Azevedo, 2013).	79
Figura 4.17 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,65$ e potência de 2 kW.	80
Figura 4.18 - Representação do campo de velocidades no plano médio da câmara de combustão.	81
Figura 4.19 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 2,05$ e potência de 2 kW.	82
Figura 4.20 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 2,26$ e potência de 2 kW.	84
Figura 4.21 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 2,45$ e potência de 2 kW.	86

Figura 4.22 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,21$ e potência de 4 kW.....	88
Figura 4.23 - Representação do campo de velocidades no plano médio da câmara de combustão operando com potência de 4 kW e $\lambda = 1,21$	89
Figura 4.24 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,41$ e potência de 4 kW.....	90
Figura 4.25 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,61$ e potência de 4 kW.....	92
Figura 4.26 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,80$ e potência de 4 kW.	94
Figura 4.27 - Emissões dos gases de combustão em função do coeficiente de excesso de ar para a câmara operando no regime de combustão sem chama a uma potência de 2 kW	97
Figura 4.28 - Emissões dos gases de combustão em função do coeficiente de excesso de ar para a câmara operando no regime de combustão sem chama a uma potência de 4 kW	98

Lista de Tabelas

Tabela 3.1 – Mecanismo de reação para o etanol.....	59
Tabela 4.1 – Condições experimentais para realização das simulações numéricas.	64
Tabela 4.2 – Comparação entre o $SMD_{EXPERIMENTAL}$ e o $SMD_{NUMÉRICO}$ para os modelos de turbulência k- ϵ e RNG k- ϵ	78
Tabela 4.3 – Emissões de poluentes para a potência de 2 kW para os testes numéricos.	95
Tabela 4.4 – Emissões de poluentes para a potência de 4 kW para os testes numéricos.	95

Simbologia

Letras Latinas

C_D	Coeficiente de arrasto
$C_{1\mu}$	Constante matemática da equação de transporte dos modelos de turbulência
$C_{2\varepsilon}$	Constante matemática da equação de transporte dos modelos de turbulência
K_v	Crítério de estabilidade ou taxa de reciculação
k	Energia cinética turbulenta
h	Entalpia
P	Potência
p	Pressão do escoamento
p_i	Flutuação de pressão
\overline{p}_i	Valor médio de pressão
q_j	Fluxo difusivo
t	Escala característica de tempo
T_{aq}	Temperatura de pré-aquecimento
T_{ij}	Tensor de pressão
u	Velocidade do escoamento
u_i	Flutuação de velocidade
\overline{u}_i	Valor médio de velocidade
Y	Concentração de espécies

Letras Gregas

δ_{ij}	Delta de Kronecker
ε	Dissipação turbulenta
λ	Coeficiente de excesso de ar
μ	Coeficiente de viscosidade molecular
μ_t	Coeficiente de viscosidade turbulenta
ρ	Massa específica do fluido [kg/m^3]
σ	Força de tensão superficial
τ_t	Escala de tempo da turbulência
τ_c	Escala de tempo da reação química
ϕ	Razão de equivalência ar/combustível

Siglas

ALR	Razão ar/líquido
CDC	<i>Colorless Distributed Combustion</i>
CFD	<i>Computational fluids dynamics</i>
C _x H _y	Hidrocarbonetos
CMC	Modelo de combustão <i>Conditional Moment Closure</i>
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Monóxido de carbono
Da	Número de Damköhler
dB	Decibéis
DO	<i>Discrete Ordinates</i>
DNS	Simulação Numérica Direta
DPM	<i>Discrete Phase Model</i>
DRW	Método de avanço randômico discreto
DT	<i>Discrete Transfer</i>
EDC	<i>Eddy dissipation concept</i>
EDM	<i>Eddy dissipation model</i>
EPFM	<i>Eulerian Particle Flamelet Model</i>
FGM	Flamelet Generated Manifold
FLOX [®]	<i>Flameless oxidation</i>
FRC	<i>Finite rate chemistry</i>
GLP	Gás liquefeito de petróleo
HiCOT	<i>High Temperature Combustion Technology</i>
HiTAC	<i>High temperature air combustion</i>
INC.	<i>Incorporation</i>
KES	Referente ao modelo de turbulência k-ε
LES	Simulação de Grandes Escalas
LISA	Modelo de fases discretas <i>Linearized Instability Sheet Atomization</i>
N ₂ O	Óxido nitroso
NO _x	Óxidos nitrogenados
NO	Óxido de nitrogênio
OH	Radical hidroxila

PDF	<i>Probability density function</i>
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
Re	Número de Reynolds
RNG	<i>Re-normalisation group method</i>
SGS	<i>Subgrid-scale model</i>
RSM	<i>Reynolds stress model</i>
SMD	Diâmetro Sauter Médio
Sh	Número de Sherwood
UHC	Hidrocarbonetos não queimados
We	número de Weber
WSGGM	<i>Weighted Sum of Gray Gas Model</i>

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 – Motivações

O desenvolvimento tecnológico e o aumento populacional que vem ocorrendo nos últimos anos aumentaram de forma significativa a demanda de energia no mundo. Segundo um estudo da *Exxon Mobil Corporation* até 2040 a demanda de energia no mundo terá um aumento de cerca de 35%, o que pode dobrar sem ganho de eficiência em processos de conversão de energia, o que mostra a necessidade do aprimoramento dos processos de geração de energia já existentes e também do desenvolvimento de novas tecnologias para atender a este aumento na demanda de energia.

Neste contexto de desenvolvimento humano e tecnológico e de geração de energia cabe estudar o processo de combustão, pois mais de 75% da energia utilizada em indústrias e até mesmo no cotidiano para movimentação de veículos surge da queima de combustíveis, principalmente fósseis. Outro ponto importante a ressaltar é que a combustão de combustíveis fósseis é um dos principais responsáveis pelos diversos problemas ambientais que a humanidade tem enfrentado. Estes fatos aceleraram as pesquisas em busca de aumento de eficiência nos processos convencionais de combustão, do desenvolvimento de novas tecnologias de combustão e de combustíveis alternativos de forma a reduzir as emissões de poluentes.

Recentemente a combustão sem chama se tornou alvo de muitas pesquisas por melhorar o desempenho nos processos de combustão e por promover uma redução significativa nos níveis de emissões de poluentes como NO_x , CO e UHC. A combustão sem chama é resultado da mistura entre combustível e jato de ar com uma forte corrente de gases

de recirculação que propiciam uma zona de reação bem distribuída com ausência de quimiluminescência no interior da câmara de combustão, ressaltando que o pré-aquecimento do ar de combustão não é pré-requisito para que o regime se manifeste (Wüning & Wüning, 1997). Além das características citadas anteriormente, algumas outras chamam muito a atenção de pesquisadores tanto do meio científico quanto do meio industrial como:

- Distribuição praticamente uniforme de temperatura na atmosfera de combustão com valores baixos, o que implica em menores emissões de NO_x , redução das tensões térmicas e conseqüentemente o aumento do tempo de vida útil da câmara de combustão;
- Redução no consumo de combustível quando se utilizam técnicas de recuperação de calor no processo para pré-aquecimento do ar de combustão e conseqüente diminuição nas emissões de CO_2 ;
- Diminuição dos níveis de ruídos no processo;
- Não há restrições quanto ao tipo de combustível a ser utilizado.

Porém para viabilizar sua aplicação a problemas práticos da engenharia é necessário um melhor conhecimento dos fenômenos físicos e químicos que governam este regime de combustão que ainda não possuem um equacionamento adequado e é neste sentido que se incentiva a utilização de ferramentas numéricas.

A análise experimental tem fornecido informações bastante esclarecedoras sobre o regime de combustão sem chama, mas um estudo mais aprofundado dos fenômenos que ocorrem na atmosfera de combustão não é tão simples neste caso devido principalmente ao custo envolvido na aparelhagem necessária para realização dos experimentos. Sendo assim muitos pesquisadores tem recorrido à modelagem numérica para investigar a fundo este novo regime de combustão.

Códigos computacionais como o CFD (*Computational Fluid Dynamic*) são utilizados para este tipo de análises, mas esta não é uma simples tarefa. O conhecimento dos modelos de turbulência, de combustão, de transferência de calor, a modelagem das emissões entre outros disponíveis neste tipo de ferramenta devem ser compreendidos e manejados de forma correta por seu usuário para obtenção de resultados condizentes com a realidade.

A modelagem numérica do regime de combustão sem chama através do CFD está bastante avançada, principalmente para estudos envolvendo a queima de combustíveis gasosos, onde se concentram a maior parte dos trabalhos encontrados na literatura sobre este regime de combustão fornecendo uma base de conhecimentos bastante sólida sobre o assunto. Quanto aos combustíveis líquidos o panorama não é o mesmo, os estudos numéricos disponíveis são recentes e as informações encontradas mostram a necessidade de estudos mais aprofundados

para a modelagem da combustão sem chama destes combustíveis. Este tipo de modelagem não envolve apenas combustão, turbulência, transferência de calor, entre outros modelos utilizados nas simulações de gases, é necessário também modelar a injeção do combustível que varia de acordo com a geometria do injetor utilizado e não é uma tarefa tão simples de se realizar em CFD, pois cada injetor desenvolve um tipo de escoamento com características físicas diferentes que devem ser minuciosamente analisadas para a reprodução correta do spray de líquido gerado pelo injetor.

Neste trabalho será simulada a combustão sem chama para etanol hidratado (96% em volume) injetado na câmara de combustão através de um injetor do tipo blurry. Esta tecnologia de injeção em sistemas de combustão sem chama é bem recente, portanto este processo necessita de estudos mais aprofundados para que haja um bom entendimento dos fenômenos físicos e químicos presentes na atmosfera de combustão e qual a real influência deste tipo de injeção na reprodução do regime de combustão sem chama. Estes pontos serão discutidos no presente trabalho através de resultados obtidos por simulações numéricas em CFD e comparados a resultados experimentais disponíveis sobre o assunto. O etanol hidratado foi escolhido por ser um dos biocombustíveis mais utilizados no Brasil e também por ter sido usado nas análises experimentais, sendo então um meio de comparação para os resultados numéricos obtidos na presente tese.

1.2 – Objetivos

Analisar a potencialidade dos modelos de turbulência, combustão e radiação disponíveis no ANSYS CFX, bem como a modelagem do spray gerado pelo injetor blurry, na reprodução do regime de combustão sem chama utilizando combustíveis líquidos, em particular neste estudo o etanol hidratado. Os modelos de combustão e turbulência serão variados e as modificações nas constantes matemáticas serão feitas, se necessário, para maior aproximação com os dados experimentais disponíveis em Azevedo (2013) e validação da modelagem numérica desenvolvida para o caso em estudo.

Os objetivos específicos do presente trabalho são:

- Caracterização do regime de combustão sem chama
- Análise da relação entre a taxa de recirculação de gases de combustão e a distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão;
- Levantamento dos gradientes de temperatura no interior da câmara e da taxa de formação de poluentes no processo de combustão;
- Analisar a influência da variação do coeficiente de excesso de ar (λ) para caracterização do regime de combustão sem chama.

1.3 – Estrutura do Trabalho

No Capítulo 1 são apresentados a motivação e os objetivos para realização da presente tese, bem como a estrutura do texto.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos utilizados como base para o estudo do regime de combustão sem chama. Na primeira parte foram abordados os trabalhos experimentais para a combustão sem chama de combustíveis líquidos e gasosos, seguida pela discussão dos trabalhos numéricos disponíveis para combustíveis gasosos. O conteúdo reunido foi utilizado como base para melhor entendimento dos fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos envolvidos no regime de combustão sem chama para finalmente abordar os trabalhos numéricos que discutem a combustão sem chama de combustíveis líquidos que mostram quais os modelos de turbulência e combustão empregados na simulação deste regime.

No Capítulo 3 é discutido o método de solução empregado no presente trabalho, ANSYS CFX. Neste capítulo são abordados os principais tipos de modelagem de turbulência utilizados em simulações numéricas, os modelos de turbulência e combustão utilizados para o desenvolvimento das simulações do presente trabalho, bem como a formulação matemática utilizada nos modelos escolhidos, e a modelagem de sprays turbulentos e os seus principais fenômenos. Por fim é apresentado o mecanismo de reação empregado para o etanol hidratado.

No Capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos nas simulações numéricas realizadas para o presente trabalho. Na primeira parte é apresentada uma discussão sobre a geometria e a malha numérica utilizadas nas simulações. Posteriormente são mostrados os resultados para simulações iniciais onde é definida a modelagem mais adequada para o problema em questão. Definidos os modelos para as simulações, são apresentadas as discussões dos resultados numéricos para as condições em que a câmara de combustão opera no regime de combustão sem chama utilizando o modelo de turbulência RNG k- ϵ , o modelo de combustão FRC (*Finite Rate Chemistry*), o modelo de radiação DT, a modelagem de fases discretas DPM e mecanismo de reação de Verma (2004) com 70 reações e 26 espécies químicas principais para o etanol. Para caracterização do regime de combustão sem chama foram discutidos pontos principais como a distribuição de temperaturas no interior da câmara, gradientes de temperatura, composição dos gases na exaustão e a influência da variação do coeficiente de excesso de ar no processo de combustão. Todos os resultados obtidos foram comparados aos resultados experimentais de Azevedo (2013) para validação da modelagem numérica.

O Capítulo 5 apresenta as conclusões obtidas neste trabalho de tese e os temas que podem ser desenvolvidos em trabalhos futuros.

Capítulo 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O Capítulo 2 tem por objetivo apresentar uma revisão de trabalhos presentes na literatura que discutem o regime de combustão sem chama abordando seus principais aspectos e características. Uma visão geral dos trabalhos disponíveis na literatura mostra uma quantidade expressiva de pesquisas sobre a combustão sem chama de combustíveis gasosos tanto do ponto de vista experimental quanto numérico, constituindo uma base bastante sólida a respeito dos fenômenos e características para este processo. Já para combustão sem chama de combustíveis líquidos os estudos ainda são muito recentes, principalmente as análises numéricas dada a dificuldade de mensurar e observar as características e fenômenos que se desenvolvem na região de injeção do spray de combustível. Sendo assim para promover melhor entendimento sobre o assunto discutido na presente tese apresenta-se na primeira parte a abordagem experimental da combustão sem chama de combustíveis gasosos seguida da discussão sobre combustíveis líquidos. A segunda parte segue a mesma estrutura, porém são apresentados os trabalhos numéricos para a combustão sem chama de combustíveis gasosos e líquidos, respectivamente.

2.1 – Regime de Combustão Sem Chama

2.1.1 - Conceito de Combustão Sem Chama

A combustão sem chama foi identificado nos anos 90 e é caracterizado por uma zona de reação bem distribuída na atmosfera da câmara de combustão resultante da recirculação interna dos gases da combustão a altas velocidades promovendo diluição progressiva da

mistura entre os reagentes e os produtos inertes provenientes da combustão o que evita a formação de chamas localizadas e faz com que a reação de combustão se distribua de forma uniforme ao longo do volume da câmara, com distribuição homogênea de temperatura e de espécies químicas tais como NO_x , CO e UHC. Este regime se manifesta somente quando a temperatura de toda a mistura se encontra a valores acima da temperatura de autoignição da mistura reagente.

Porém, esta é uma definição aproximada para este regime de combustão a partir do qual não podem se realizar análises em um processo de combustão. Sendo assim no item seguinte do presente capítulo é apresentada uma revisão dos trabalhos experimentais da literatura para levantamento de informações que permitam um entendimento mais abrangente do conceito de Combustão Sem Chama.

2.1.2 - Abordagem Experimental Para Combustíveis Gasosos

A combustão sem chama é uma tecnologia relativamente nova desenvolvida com a finalidade de reduzir a emissão de gases poluentes como o NO_x e o CO bem como aumentar a eficiência dos processos em combustores. Na década de 1990 os estudos se intensificaram em cima desta tecnologia tendo em vista a viabilidade deste processo em relação à combustão convencional.

Este fenômeno foi observado pela primeira vez pelos pesquisadores J. A. Wüning e J. G. Wüning durante um experimento em um queimador regenerativo (Ver Figura 2.1). O regime de combustão sem chama se manifestou para temperatura de fornalha de 1000°C e ar pré-aquecido a 650°C . Nestas condições o combustível foi completamente queimado, não houve a formação de chama convencional e as emissões de CO e NO_x foram extremamente baixas. Inicialmente pensou-se que o queimador estava com problemas operacionais, mas estudos posteriores levaram os pesquisadores J. A. Wüning e J. G. Wüning a um novo regime de combustão denominado combustão sem chama, chamado por eles FLOX (do inglês: *Flameless Oxidation*).

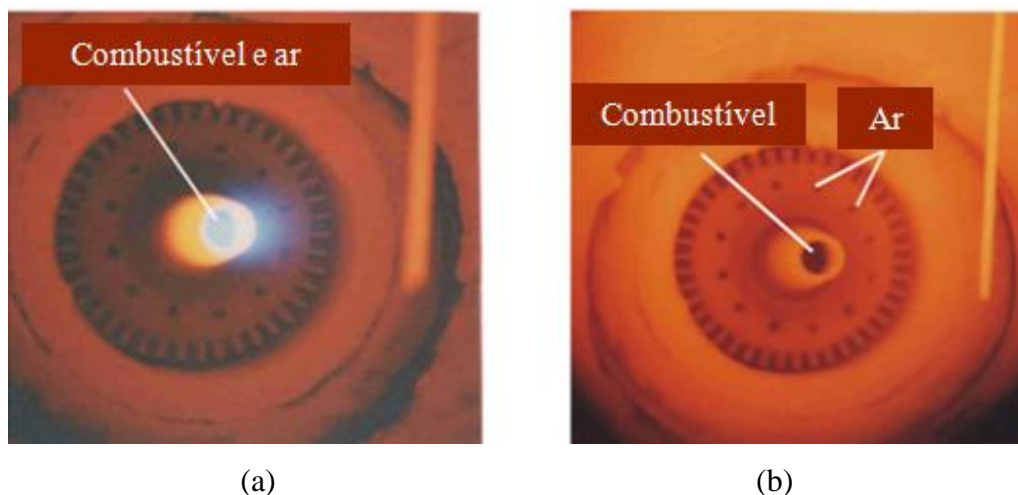


Figura 2.1 – Regimes de combustão: (a) convencional e (b) Regime de Combustão sem Chama obtidos nos experimentos realizados por Wüning & Wüning (1997).

O regime de combustão sem chama recebe várias denominações no meio científico e industrial e estas são dadas de acordo com os parâmetros utilizados no processo. Dentre elas destacam-se os nomes *Flox®*, *HiTAC*, *HiCOT*, *Mild Combustion* e *Colorless Distributed Combustion* (CDC).

Katsuki et al., (1998) denominaram este novo regime *HiTAC*, sigla do inglês *High Temperature Air Combustion*, um termo muito comum na literatura. Neste processo a temperatura de entrada do ar de combustão na câmara deve ser alta de modo que a temperatura de entrada dos reagentes seja maior que a temperatura de autoignição da mistura. Este mesmo processo também é conhecido como *HiCOT* (*High Temperature Combustion Technology*), que se refere de forma geral a todas as tecnologias que exploram a alta temperatura de entrada dos reagentes (Cavaliere & Joannon, 2004).

Outro termo relacionado ao regime de combustão sem chama é o “*Mild Combustion*” que é caracterizado por dois parâmetros: a elevada temperatura de entrada dos reagentes e os baixos gradientes de temperatura atingidos durante as reações que ocorrem no interior da câmara de combustão.

Cavaliere & Joannon (2004) fizeram uma revisão sobre a *Mild Combustion* analisando os aspectos físicos, termodinâmicos e químicos do processo, levantando o maior número possível de informações e promovendo um conhecimento mais aprofundado sobre os fundamentos e aplicações deste processo, além de caracterizá-lo sob o ponto de vista de diversos autores como Oberlack et al., (2000), Peters (2000) e Kumar et al., (2002).

Gupta et al., (2003) classificaram este novo regime de combustão como *Colorless Distributed Combustion* (CDC). Eles mostram que a alta temperatura de entrada do ar de combustão é um dos principais parâmetros, como ocorre na *HiTAC*, porém se diferencia pela

alta intensidade da reação de combustão com tempo de residência mais curto e por exigir uma mistura homogênea dos reagentes (ar, combustível e gases quentes) a fim de promover uma reação de combustão bem distribuída por todo o espaço do combustor.

Por apresentar características interessantes como baixos níveis de emissão de gases e baixos gradientes de temperatura no interior da câmara, vários pesquisadores partiram para o estudo deste processo a fim ampliar seu campo de aplicação como câmaras de combustão de turbinas a gás e fornalhas petroquímicas.

Wüning & Wüning (1997) desenvolveram um estudo sobre o processo de combustão sem chama apresentando os princípios básicos desta tecnologia e exemplos de aplicação. Os resultados obtidos experimentalmente foram analisados através de simulações numéricas em CFD.

Segundo os autores o regime de combustão sem chama exige condições controladas de mistura dos reagentes e de temperatura no interior da câmara de combustão. O processo foi idealizado pelos autores conforme mostrado na Figura 2.2, que é dividida em três regiões I, II e III.

Na região I o ar de combustão é misturado com os gases de recirculação aumentando sua temperatura e velocidade de escoamento. Esta mistura segue para a região II, onde o combustível é adicionado à mistura dando início a reação de combustão. Na região III calor é retirado dos produtos da combustão a fim de manter os níveis de temperatura na região II a valores suficientes para sustentar a reação de combustão que ocorre na mesma, valor este que não deve exceder 1850 °C. Durante a reação de combustão uma grande quantidade de gases inertes encontra-se dispersa na atmosfera da câmara e valores de temperatura acima do limite levam à alta taxa de formação de NO_x.

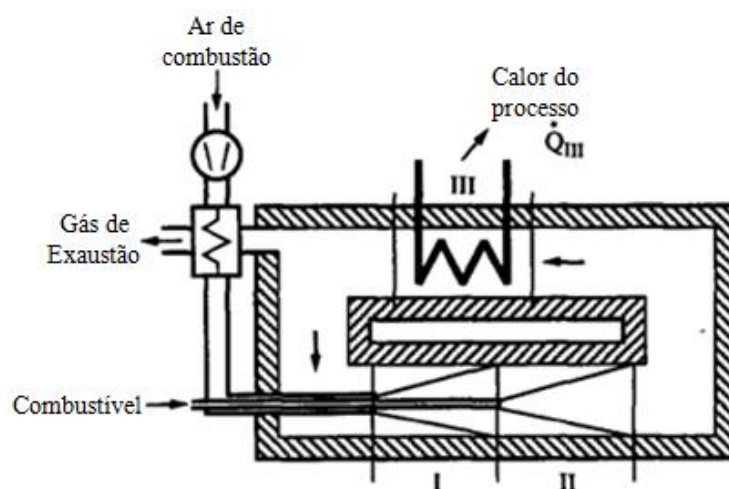


Figura 2.2 – Processo idealizado do Regime de Combustão sem Chama. Wüning & Wüning (1997).

Wüning & Wüning (1997) ainda observaram que a recirculação dos gases de exaustão leva ao aumento da quantidade de inertes na atmosfera da câmara. Para controlar este problema, definiram então o parâmetro Taxa de Recirculação, também denominado critério de estabilidade, “ K_v ”, que é definido na Equação (2.1):

$$K_v = \frac{\dot{m}_E}{\dot{m}_F + \dot{m}_A} \quad (2.1)$$

Onde \dot{m}_E representa a vazão mássica de gás de exaustão recirculada, \dot{m}_F a vazão mássica de combustível e \dot{m}_A a vazão mássica de ar de combustão.

Com base na taxa de recirculação dos gases de exaustão os autores elaboraram um diagrama onde foram definidos os limites de estabilidade para três regimes de combustão em função da temperatura da câmara de combustão representado na Figura 2.3.

No diagrama da Figura 2.3 são definidas três regiões A, B e C. A região A corresponde às reações de combustão com chamas estáveis, onde os limites de inflamabilidade para combustão de hidrocarbonetos e ar mostram que é possível atingir misturas inflamáveis para $K_v \leq 0,5$. Assim a quantidade de produtos de recirculação gerados é suficiente para estabilizar a chama. O aumento do valor da taxa de recirculação no processo leva ao aparecimento de chamas instáveis, representadas na região B. A combinação entre temperatura e taxa de recirculação pode levar ao descolamento da chama e para temperaturas no interior da câmara inferiores à temperatura de ignição da mistura ocorre a extinção da chama.

O regime de combustão sem chama é definido na Figura 2.3 pela região C onde se observa que se a temperatura do combustor e K_v possuem valores suficientemente altos, o combustível pode reagir de forma estável e constante no regime de combustão sem chama. Outro ponto importante observado na Figura 2.3 é que não é possível obter o regime de combustão sem chama com a câmara de combustão fria, o procedimento comumente indicado é aquecer a câmara com o processo de combustão convencional elevando os níveis de temperatura no interior desta a valores superiores ao de temperatura de autoignição da mistura reagente e a partir de então o combustor passa a operar no regime de combustão sem chama.

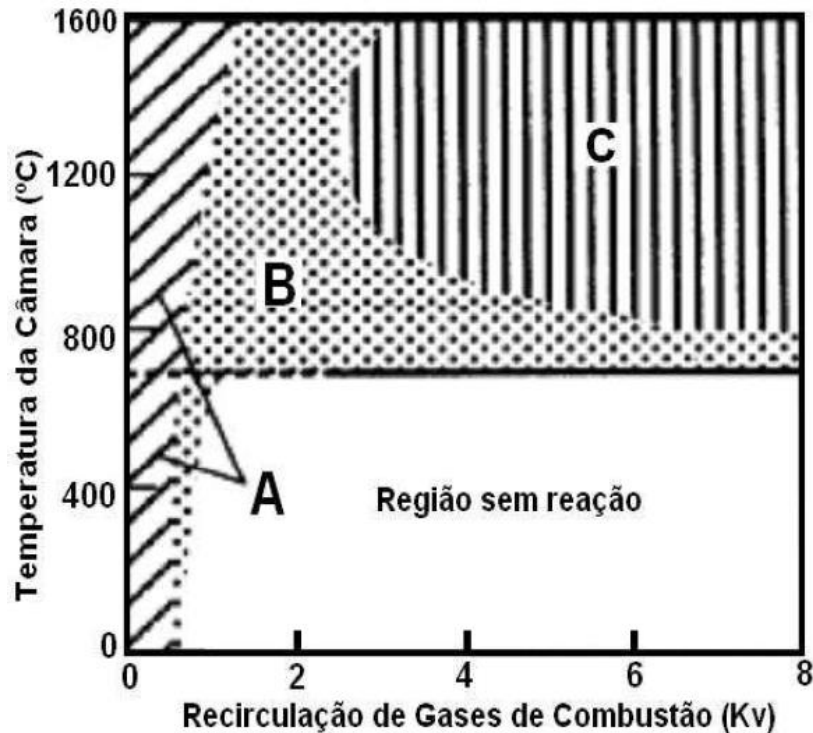


Figura 2.3 – Diagrama de limites de estabilidade para diferentes modos de combustão.

Wüning & Wüning (1997).

Outras características que, na visão dos autores, chamam atenção para este regime são:

- Baixos gradientes de temperatura no interior da câmara, evitando a formação de pontos quentes;
- A supressão da formação de NO_x térmico devido aos baixos gradientes de temperatura;
- Baixa concentração de espécies, que aliada aos baixos gradientes de temperatura, implica em menor formação de poluentes e
- Baixos níveis de emissão de ruídos durante o processo.

Os resultados apresentados por Wüning & Wüning (1997) despertaram o interesse de outros pesquisadores devido aos muitos pontos positivos encontrados no regime de combustão sem chama. Com isso estudos posteriores se desenvolveram com a finalidade de esclarecer os fenômenos envolvidos neste novo regime e a partir daí expandir sua aplicação a sistemas práticos que utilizam combustão em seus processos. Como Plessing et al., (1998), que investigaram o regime de combustão sem chama utilizando metano como combustível. Os resultados foram analisados através de uma técnica óptica de medição de concentração de radical hidroxila (OH), eles observaram que a concentração de radical OH na região onde ocorre a reação de combustão é menor para a combustão sem chama frente às concentrações encontradas na combustão convencional. Os autores obtiveram a combustão sem chama a

temperaturas superiores a 680°C e gradientes de temperatura no interior da câmara de combustão variando entre 200°C e 400°C , com limites máximos de temperatura não ultrapassando 1380°C . Outro resultado muito interessante foi que mesmo utilizando altas temperaturas de pré-aquecimento do ar de combustão houve supressão na formação de NO térmico.

Gupta (2000) pesquisou características químicas e térmicas do regime HiTAC, uma das variáveis do regime de combustão sem chama, utilizando como combustível uma mistura de propano-ar. Os parâmetros aplicados ao processo foram o ar de combustão pré-aquecido a 1100°C variando as concentrações de oxigênio no mesmo entre 2% a 20%. Os resultados obtidos mostraram que a reação de combustão no processo HiTAC é mais estável, quando comparada às reações que ocorrem nos processos de combustão convencional, e se distribui de forma homogênea no interior da câmara de combustão. Foram obtidos também baixos níveis de emissão de NO_x , CO e UHC (Do inglês: “*Unburned Hydrocarbon*”).

Quanto ao comportamento térmico e químico do processo, os autores concluíram que há uma forte dependência das propriedades do combustível, da temperatura de pré-aquecimento do ar de combustão e principalmente da concentração de oxigênio do ar, pois à medida que esta diminui a chama muda de cor, tornando-se praticamente incolor para concentrações muito baixas de oxigênio, conforme apresentado na Figura 2.4.

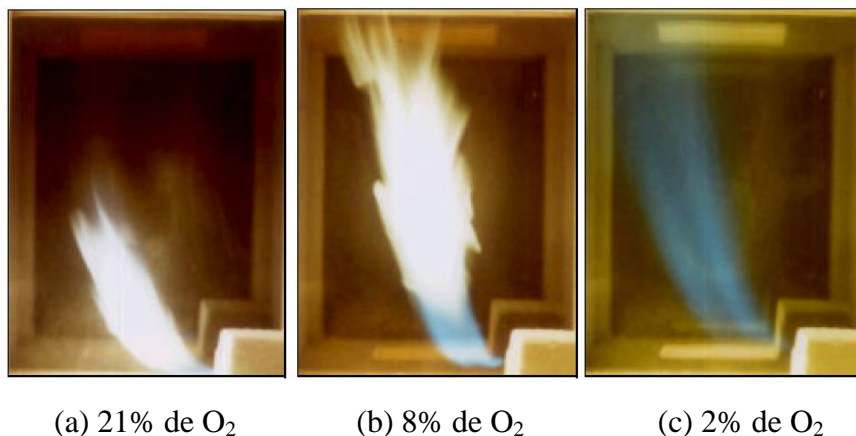


Figura 2.4 – Comportamento da chama na reação de combustão com ar pré-aquecido a 1100°C e concentração de oxigênio, O_2 , em (a) 21%, (b) 8% e (c) 2%. Gupta (2000).

Gupta (2000) ainda analisou o comportamento de chamas de metano com temperatura de pré-aquecimento do ar de combustão de 1000°C e para as mesmas concentrações de O_2 utilizadas anteriormente. A diferença entre os dois combustíveis reside na intensidade luminosa da chama, que para o metano torna-se praticamente invisível para baixas concentrações de O_2 no ar de combustão (Ver Figura 2.5).

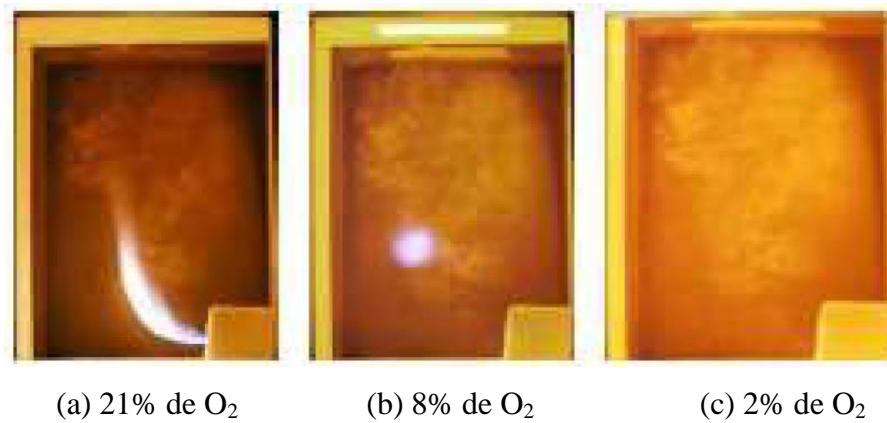


Figura 2.5 – Chamas de metano com ar de combustão pré-aquecido a 1000 °C e concentração de oxigênio, O₂, em (a) 21%, (b) 8% e (c) 2%. Gupta (2000).

Uma revisão bibliográfica extensa sobre o regime de combustão sem chama foi feita por Cavaliere & Joannon (2004). Eles apresentaram em seu trabalho uma análise envolvendo os aspectos físicos, químicos e termodinâmicos do processo, bem como conceitos fundamentais para entendimento do mesmo. Parâmetros como campo de temperatura, pressão de operação, concentração de espécies na região de combustão e exaustão e as potencialidades do novo regime foram discutidas. Em suas conclusões os autores definem o regime de combustão sem chama como um processo de combustão onde a temperatura de entrada da mistura reagente no combustor deve ser superior à temperatura de autoignição desta mistura e que o aumento de temperatura na zona de reação não deve ultrapassar o valor da temperatura de autoignição da mistura.

Kumar et al., (2005) realizaram um experimento para reproduzir o regime de combustão sem chama utilizando os combustíveis GLP (gás liquefeito de petróleo) e “*producer gas*” para comparação de resultados com o regime de combustão convencional. Os autores conseguiram atingir o regime de combustão sem chama onde os níveis de emissão de poluentes e de ruídos do processo foram reduzidos significativamente frente à combustão convencional. Outra conclusão importante foi que em seu experimento não houve pré-aquecimento do ar de combustão, sendo este injetado à temperatura ambiente e sem diluição prévia dos reagentes para reprodução do novo regime, fazendo frente ao fato da necessidade do pré-aquecimento do ar de combustão proposto por outros autores na literatura, como por exemplo, Wüning & Wüning (1997).

Variações no projeto da câmara de combustão também foi um ponto de análise no regime de combustão sem chama. Szegö et al., (2009) elaboraram uma fornalha para estudos sobre este novo regime em uma configuração onde os jatos de ar de combustão e de

combustível são paralelos ao canal de exaustão e montados na mesma parede. Experimentos foram realizados com ar de combustão com e sem pré-aquecimento.

Os autores obtiveram a combustão sem chama dos dois modos confirmando o que foi mostrado por Kumar et al., (2005) quando afirmaram que o pré-aquecimento do ar de combustão não é requisito para atingir este regime. Outra conclusão deste trabalho diz respeito à configuração utilizada na fornalha que promoveu grande uniformidade no campo de temperaturas na atmosfera de reação. Ao final de sua pesquisa, os autores mostraram que o critério de estabilidade (K_v), definido por Wüning & Wüning (1997) varia para cada tipo de câmara de combustão, sendo necessário um conhecimento aprofundado do campo de escoamento para definição deste.

Castela (2010) estudou o regime de combustão sem chama em uma fornalha laboratorial utilizando a mesma configuração de injeção de ar e combustível e exaustão apresentada por Szegö et al., (2009). Os parâmetros de análise do processo foram a temperatura de pré-aquecimento do ar de combustão e o coeficiente de excesso de ar (λ).

Os valores de temperatura de pré-aquecimento (T_{aq}) do ar de combustão que apresentaram resultados mais expressivos foram 300 K, 400 K, 500 K e 600 K. Porém, a estas temperaturas o coeficiente de excesso de ar deveria estar acima do limite inferior de operação da fornalha $\lambda=1,3$, pois valores abaixo deste tornam a reação de combustão instável havendo desprendimento de chama. Para valores crescentes de λ , em torno de 1,4, há a diminuição da intensidade luminosa da chama, tornando-se praticamente incolor, acompanhada da diminuição dos níveis de ruído do processo para valores mais elevados de λ . O limite superior de λ foi definido em 3,8, pois valores acima deste implicam em temperaturas adiabáticas de chama muito baixas, descaracterizando o regime de combustão sem chama.

Os níveis de emissão de NO_x , CO e UHC foram baixos apresentando forte dependência da combinação entre temperatura de pré-aquecimento e λ .

Arghode & Gupta (2010) analisaram a viabilidade da aplicação do regime de combustão sem chama a câmaras de combustão de turbinas a gás. Em seu experimento os autores utilizaram quatro configurações de injeção de ar e combustível na câmara (Ver Figura 2.6) para análise do campo de escoamento variando a razão de equivalência ar/combustível (ϕ) entre 0,7 e 0,9. Cada uma dessas configurações reproduz um determinado campo de escoamento que, conforme os autores tem forte influência sobre o jato de combustível injetado e a mistura reagente formada (Ar/Combustível).

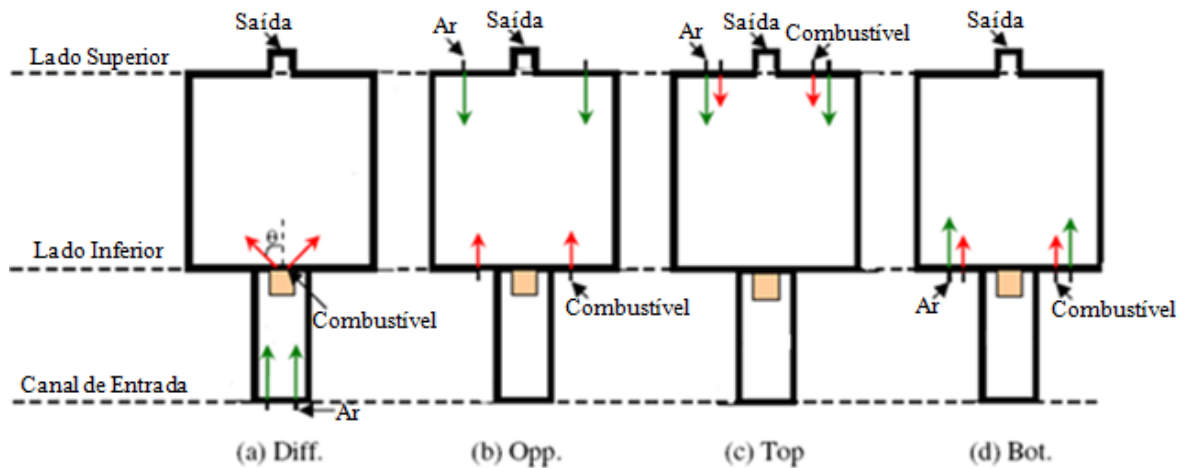


Figura 2.6 - Configurações para injeção de ar e combustível na câmara de combustão.

Arghode& Gupta (2010).

O regime de combustão sem chama foi obtido para as configurações "Opp." e "Bot.", onde no interior da câmara de combustão observou-se uma zona de reação bem distribuída, campos de temperatura uniformes, baixas taxas de emissão de NO (7 ppm, $\phi = 0,7$) e CO (20 ppm, $\phi = 0,7$) e diminuição dos níveis de ruído no processo (Ver Figura 2.7.b e 2.7.d). Nas configurações "Diff." e "Top." a reação de combustão e a distribuição de temperatura no interior da câmara se apresentaram instáveis, com altas taxas de emissão de NO e CO e de ruídos. Na Figura 2.7 encontram-se as fotografias do ensaio feito pelos autores.

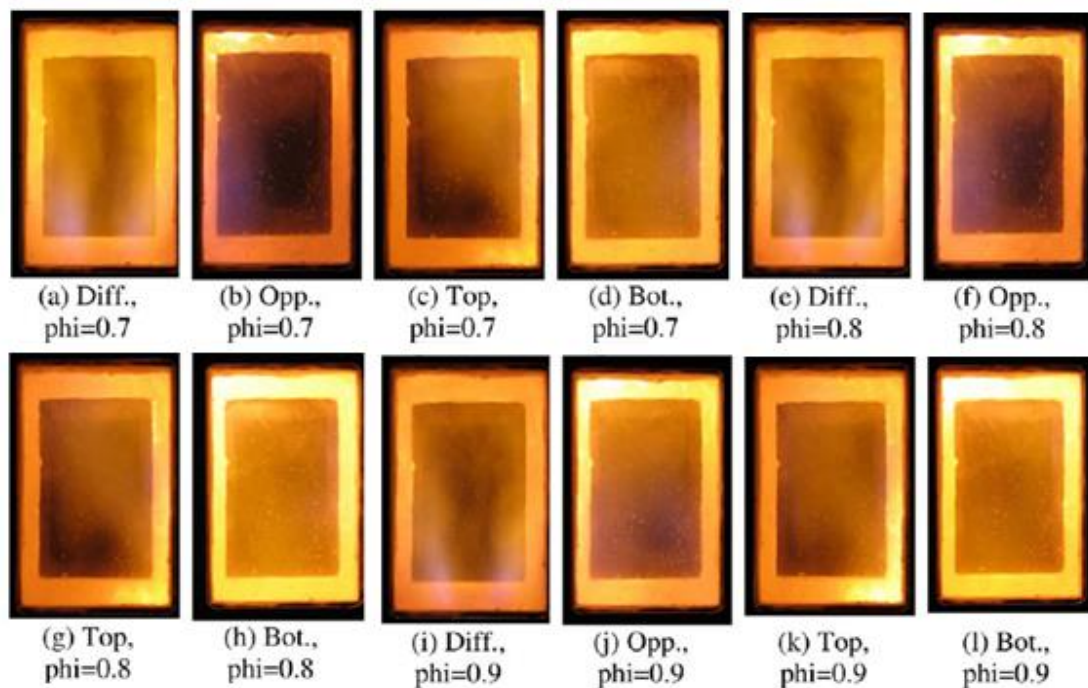


Figura 2.7 - Comportamento da chama para as quatro configurações com a variação da razão de equivalência (ϕ). Arghode& Gupta (2010).

Veríssimo (2011) realizou um ensaio experimental em uma câmara de combustão operando em regime de combustão sem chama utilizando metano como combustível. Para análise dos resultados foram utilizadas imagens de quimiluminescência do radical hidroxila as quais mostraram que o regime de combustão é fortemente influenciado pelas condições de operação da câmara, sendo estas a velocidade do ar, temperatura, carga térmica de combustível e coeficiente de excesso de ar (λ). As imagens do radical OH mostraram que para valores mais baixos de λ a reação de combustão se distribui de forma homogênea no interior da câmara e os gradientes de temperatura encontrados são baixos, caracterizando o processo de combustão sem chama. Valores maiores de λ levam a formação de uma frente de chama na região onde ocorre a mistura dos reagentes e conseqüentemente a altos gradientes de temperatura. As imagens de quimiluminescência do radical OH para variação de λ são apresentadas na Figura 2.8.

O autor ainda verificou em seu experimento a baixa emissão de espécies como o NO, devido à supressão do mecanismo de formação de NO térmico e de CO, propiciada pela alta taxa de mistura que ocorre no interior da câmara. Ainda houve a inibição da formação de UHC e C_2 .

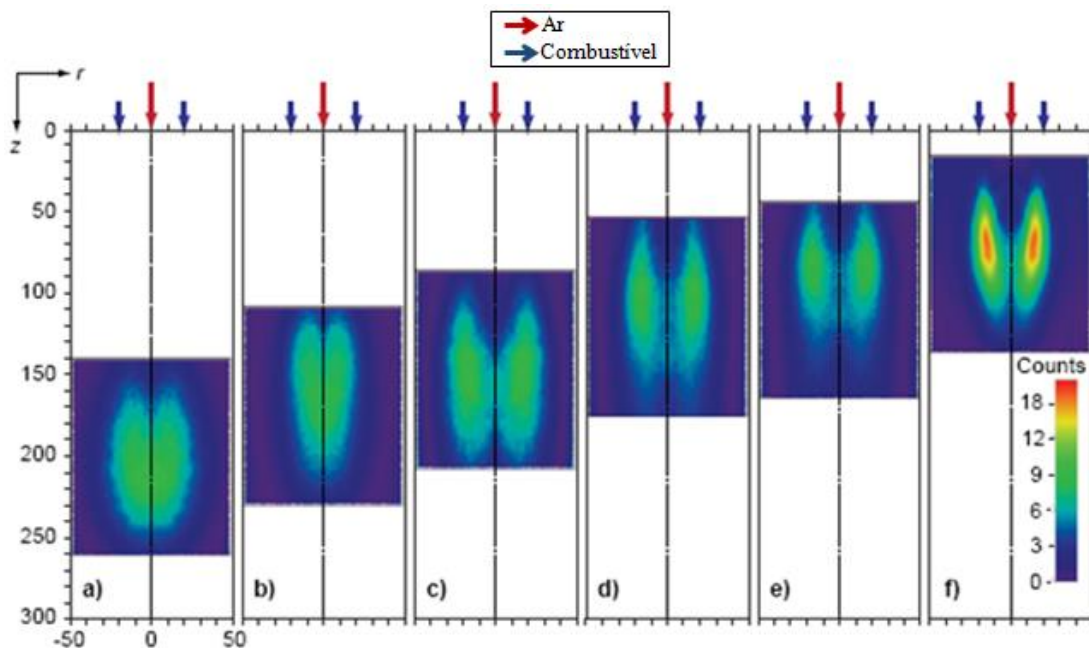


Figura 2.8 – Imagens da distribuição do radical hidroxila (OH) no interior da câmara de combustão em função do coeficiente de excesso de ar. a) $\lambda = 1,1$; b) $\lambda = 1,3$; c) $\lambda = 1,5$; d) $\lambda = 1,7$; e) $\lambda = 1,9$ e f) $\lambda = 2,1$. Veríssimo (2011).

Ayoub et al., (2012) desenvolveram um experimento para obtenção do regime de combustão sem chama com mistura de combustíveis como metano/hidrogênio em uma câmara de combustão laboratorial e observaram que o regime se manifesta

independentemente da proporção dos componentes da mistura. A presença do hidrogênio na mistura combustível influenciou os níveis de emissão de NO_x e CO, diminuindo a formação de NO_x principalmente pelo processo NO-Prompt e juntamente com o aumento da taxa de excesso de ar reduziu a emissão de CO no processo. Um teste foi realizado utilizando apenas hidrogênio puro como combustível sem pré-aquecimento do ar de combustão e os autores observaram que a câmara operou no regime de combustão sem chama em condições próximas a zero emissão de NO_x .

Oliveira (2012) apresentou em sua tese um estudo experimental realizado em um combustor e um queimador, ambos de escala laboratorial, operando no regime de combustão sem chama para temperaturas de pré-aquecimento do ar de combustão menores que a temperatura de ignição do combustível, neste caso o gás natural veicular (GNV). O regime de combustão sem chama foi caracterizado através da distribuição de temperatura no interior da câmara, dos níveis de emissões de poluentes e de observações visuais. O autor concluiu que para a geometria de câmara testada o pré-aquecimento do ar de combustão a 250°C foi fundamental para obtenção do regime de combustão sem chama que se manifestou para temperatura variando entre 870 e 1040°C , com gradientes de temperatura inferiores a 110°C . Outro parâmetro analisado foi a razão de equivalência ar/combustível que variou de 0,7 a 1,1 e o regime de combustão sem chama foi obtido para as razões de equivalência 0,9, 1,0 e 1,1. Para estes valores houve aumento da temperatura da parede da câmara para valores em torno de 260°C inibindo instabilidades térmicas no volume da câmara e favorecendo a sustentação do regime de combustão sem chama. Nestas condições ainda houve redução dos níveis de emissão de NO_x e CO.

2.1.3 - Abordagem Experimental Para Combustíveis Líquidos

Até o presente momento foram discutidos resultados relativos ao regime de combustão sem chama para combustíveis gasosos, pois são os trabalhos que mais se destacam na literatura. As pesquisas com aplicações para combustíveis líquidos são bem recentes devido às condições necessárias para utilização destes. Os trabalhos envolvendo este tipo de combustível tem seu foco na estrutura da câmara de combustão, principalmente no sistema de injeção que é o responsável pela vaporização do combustível dando maior eficiência ao processo. Estas e demais características da combustão sem chama de combustíveis líquidos serão apresentadas a seguir.

Um dos primeiros trabalhos com combustíveis líquidos de destaque é Torresi et al., (2010) que analisou o regime de combustão sem chama através de experimentos e simulações numéricas utilizando óleo diesel, um queimador aerodinâmico de múltiplos estágios e ar de

combustão diluído e altamente pré-aquecido na entrada do sistema. O intuito de reproduzir o regime de combustão sem chama foi alcançado e a comparação quantitativa entre os resultados numéricos e experimentais foi positiva, conforme ilustra a Figura 2.9. O autor ainda destaca que houve queima completa do óleo diesel e distribuição uniforme do campo de temperaturas.

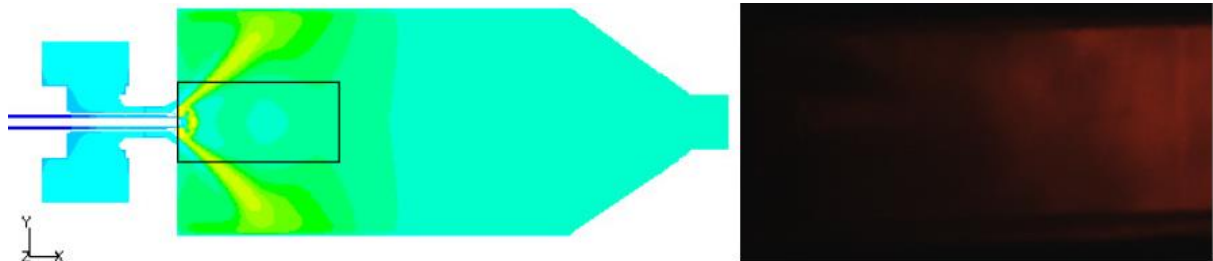
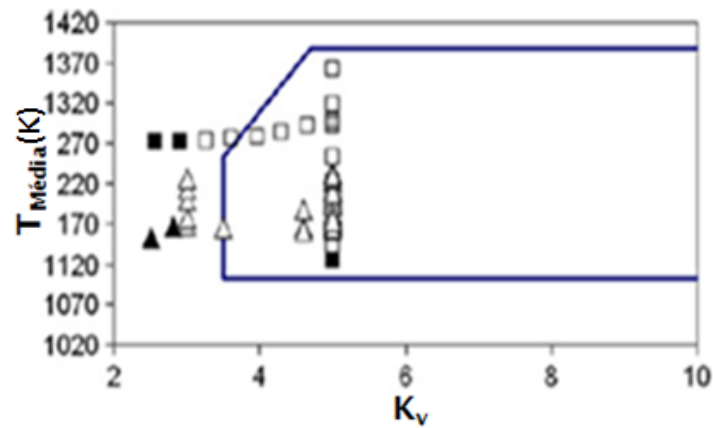
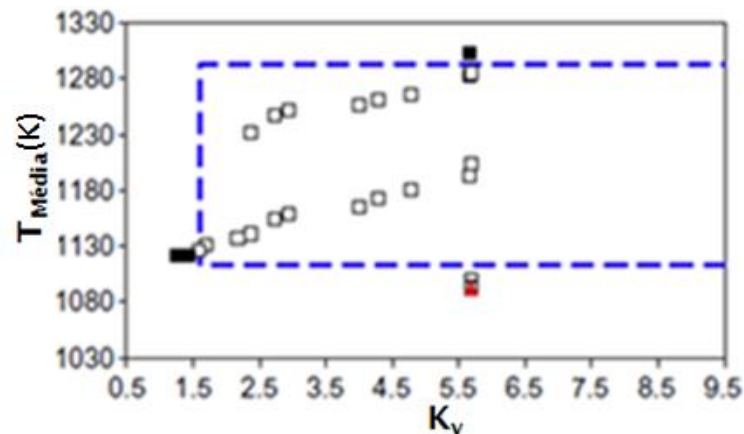


Figura 2.9 – Comparação entre os resultados numérico e experimental para o regime de combustão sem chama. Reproduzida de Torresi et al., (2010).

Derudi & Rota (2011) compararam os resultados experimentais obtidos na combustão sem chama de combustíveis gasosos (metano e GLP) e líquidos (n-octano, n-octano/i-octano, n-octano/i-octano/n-decano). Para injeção dos combustíveis foi utilizado uma configuração de bocal duplo, que deu maior sustentabilidade à combustão sem chama. Os níveis de emissões de NO_x foram baixos para ambos tipos de combustíveis, se mantendo abaixo de 12 ppm e o regime de combustão sem chama se manteve estável durante os experimentos. A diferença entre os dois tipos combustíveis é a faixa de temperatura e de K_v em que a câmara opera no regime de combustão sem chama, conforme mostrado na Figura 2.10 onde se vê que os combustíveis de mesma natureza física encontram-se dentro da mesma faixa de operação da câmara, mas há variação da faixa de operação da câmara no regime de combustão sem chama para os combustíveis líquidos e gasosos. Com isso os autores concluem que neste regime de combustão o estado físico do combustível é muito mais relevante frente ao tamanho da cadeia de carbono do combustível.



(a) Combustíveis gasosos



(b) Combustíveis Líquidos

Figura 2.10 – Faixas de operação da câmara de combustão no regime de combustão sem chama para os diferentes tipos de combustíveis utilizados. Derudi & Rota (2011).

Reddy et al., (2013) estudaram o regime de combustão sem chama experimental e numericamente em um combustor de dois estágios. Os combustíveis utilizados foram querosene, gasolina e óleo diesel. O foco de estudo foi a variação da emissão de poluentes com a potência térmica do combustor que operou nos valores de 20, 30, 40 e 60 kW. Outros parâmetros variados no processo foram a razão de equivalência ar/combustível e o coeficiente de excesso de ar na mistura. Na Figura 2.11 observa-se que a concentração de CO e C_xH_y diminui com o aumento da razão de equivalência para os três combustíveis, independentemente da utilização de excesso de ar na mistura reagente. Já a concentração de NO_x aumenta com o aumento da razão de equivalência para os três combustíveis, apresentando valores menores quando utiliza-se excesso de ar na mistura reagente. A temperatura máxima de operação não ultrapassou 1800°C para todos valores de potência térmica utilizados e os níveis de ruído mantiveram-se em torno de 84 dB, sendo estes bem abaixo daqueles obtidos para o mesmo combustor operando em regime de combustão convencional que giram em torno de 102 dB.

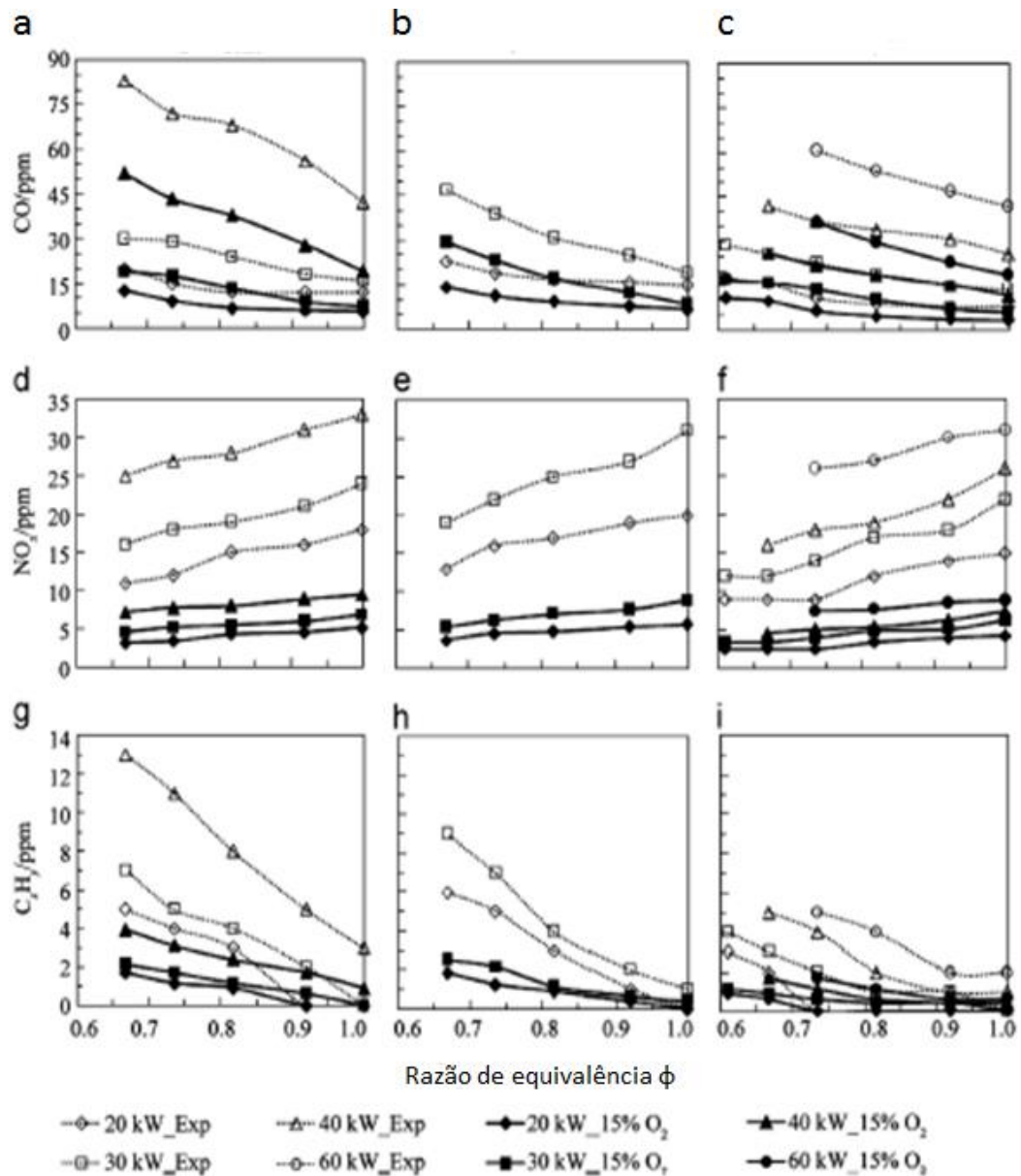


Figura 2.11 - Taxa de emissão de poluentes para diferentes razões de equivalência, potência de operação e coeficiente de excesso de ar. Derudi & Rota (2011).

Azevedo (2013) desenvolveu em seu trabalho de doutorado um sistema compacto de combustão sem chama para queima de biocombustíveis líquidos utilizando um injetor do tipo blurry. O combustível utilizado nas análises foi o etanol hidratado. Para atingir o regime de combustão sem chama a câmara de combustão foi pré-aquecida através da combustão convencional, o qual elevou a temperatura no interior da câmara acima da temperatura de autoignição da mistura, em torno de 800°C, ocorrendo então a transição para o regime de combustão sem chama. A autora levantou durante seu experimento o perfil de aquecimento para as temperaturas na parede da câmara durante a obtenção do equilíbrio térmico e representou este perfil de forma gráfica (Ver Figura 2.12).

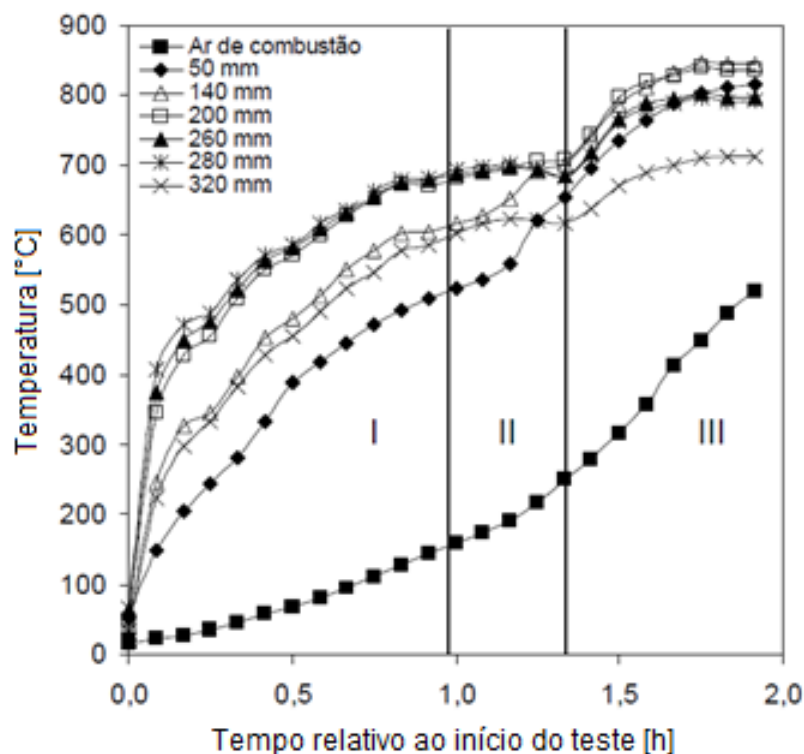


Figura 2.12–Perfil de aquecimento da câmara de combustão durante o experimento.
Reproduzido de Azevedo (2013).

Na Figura 2.12 existem três regiões definidas onde se observa a distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão. Na região I os gradientes de temperatura são altos no interior da câmara representando o regime de combustão convencional. Na região II os gradientes de temperatura começam a diminuir o que indica a transição entre regimes. Ao atingir a região III os gradientes de temperatura são muito baixos na região onde a reação de combustão se desenvolve mostrando uma estabilidade térmica do processo caracterizando o regime de combustão sem chama.

Os dados experimentais utilizados na caracterização do regime de combustão sem chama foram divididos em dois grupos: 1) Câmara operando com 2 kW de potência com coeficientes de excesso de ar iguais 1,65; 2,05; 2,26 e 2,45; 2) Câmara operando com 4 kW de potência e coeficientes de excesso de ar iguais 1,21; 1,41; 1,61 e 1,80.

Para o primeiro grupo o levantamento dos perfis de temperatura mostrou que os gradientes de temperatura no interior da câmara não ultrapassaram 200°C e os picos máximos de temperatura não ultrapassaram 920°C, condições estas que caracterizam o regime de combustão sem chama, conforme apresentado na Figura 2.13.

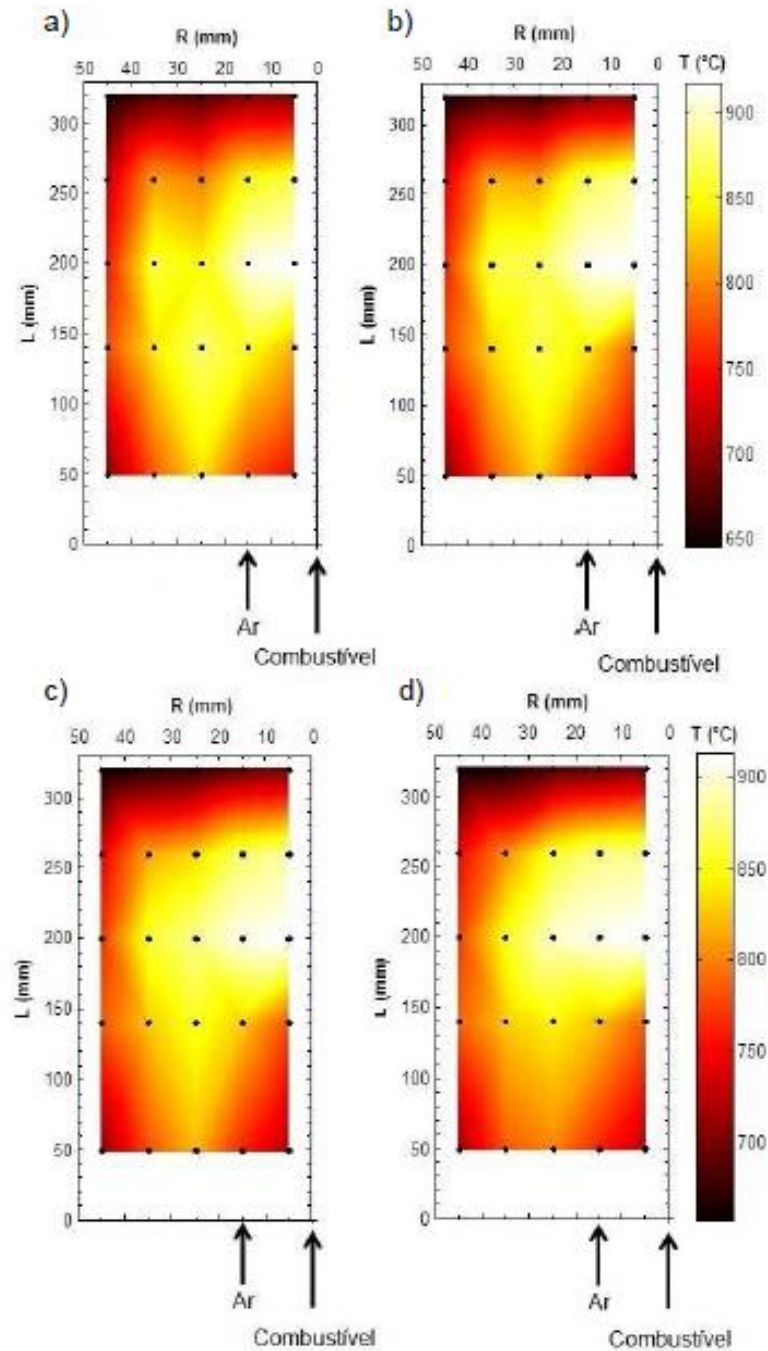


Figura 2.13 – Distribuição de temperatura para a) $\lambda = 1,65$; b) $\lambda = 2,05$; c) $\lambda = 2,26$; d) $\lambda = 2,45$ com a câmara de combustão operando a 2 kW. Azevedo (2013).

Os perfis de temperatura analisados para o segundo grupo apresentaram picos máximos de temperatura em torno de 1000°C e gradientes de temperatura no interior da câmara de aproximadamente 180°C , resultados suficientes para caracterizar o regime de combustão sem chama. Os perfis de temperatura são mostrados na Figura 2.14.

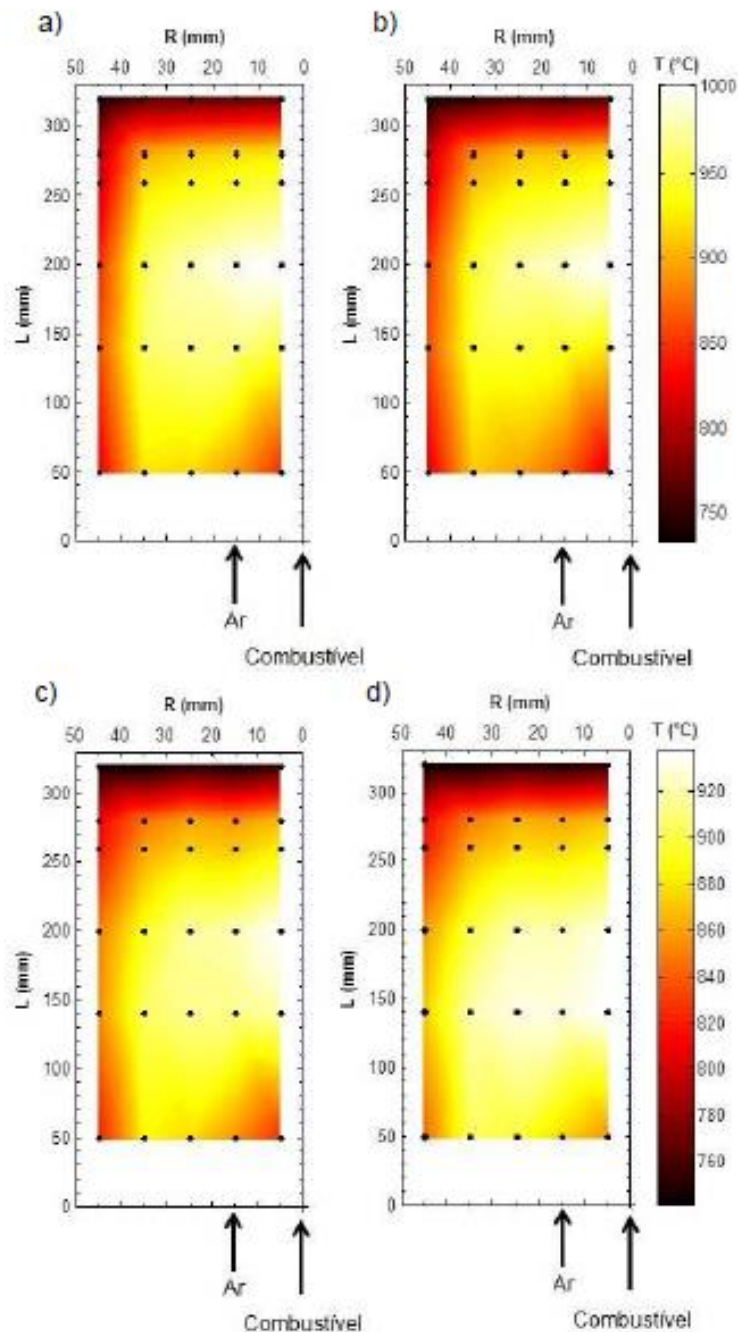


Figura 2.14 – Distribuição de temperatura para a) $\lambda = 1,21$; b) $\lambda = 1,41$; c) $\lambda = 1,61$; d) $\lambda = 1,80$ com a câmara de combustão operando a 4 kW. Azevedo (2013).

Azevedo (2013) também analisou as emissões de poluentes (NO_x , CO, CO_2 , UHC) em função de λ (coeficiente de excesso de ar) e os resultados mostraram que estas mantiveram-se abaixo de 10 ppm. À medida que o excesso de ar aumenta as emissões de NO_x , CO e UHC diminuem, devido ao aumento da velocidade de entrada de ar, que promove melhor mistura dos reagentes e maior eficiência no processo de combustão.

2.1.4 - Abordagem Numérica Para Combustíveis Gasosos

A utilização de ferramentas numéricas no estudo de problemas práticos da engenharia, como a combustão, é muito comum tanto no meio científico quanto no ambiente industrial. Estas ferramentas, devidamente validadas com resultados experimentais, promovem um melhor entendimento dos fenômenos envolvidos nestes problemas, permitindo assim determinar para estes as condições de operação que resultam em maior eficiência no processo.

A análise dos fenômenos presentes na combustão via ferramenta numérica CFD se tornou muito comum nos últimos anos. Exemplos de aplicação são o estudo de efeitos de novas configurações de queimadores para diferentes condições de trabalho em câmaras de combustão, investigação de novos regimes de combustão, transição entre regimes e otimização de câmaras de combustão.

Simulações numéricas envolvendo o regime de combustão sem chama são bem recentes, sendo os primeiros resultados levantados na década de 90. Os primeiros códigos em CFD para o presente regime de combustão foram desenvolvidos pela *R & D Project*, uma empresa alemã (Wüning, 2005). Wüning (2005) aplicou esta ferramenta ao regime de combustão sem chama e comparou os resultados numéricos com os experimentais obtidos em Wüning (1997). Na Figura 2.15 pode-se observar a boa concordância entre os resultados experimentais e do modelo CFD utilizado para a distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão. Não são dados muitos detalhes da simulação, portanto não é possível discutir com clareza o que foi mostrado pelo autor.

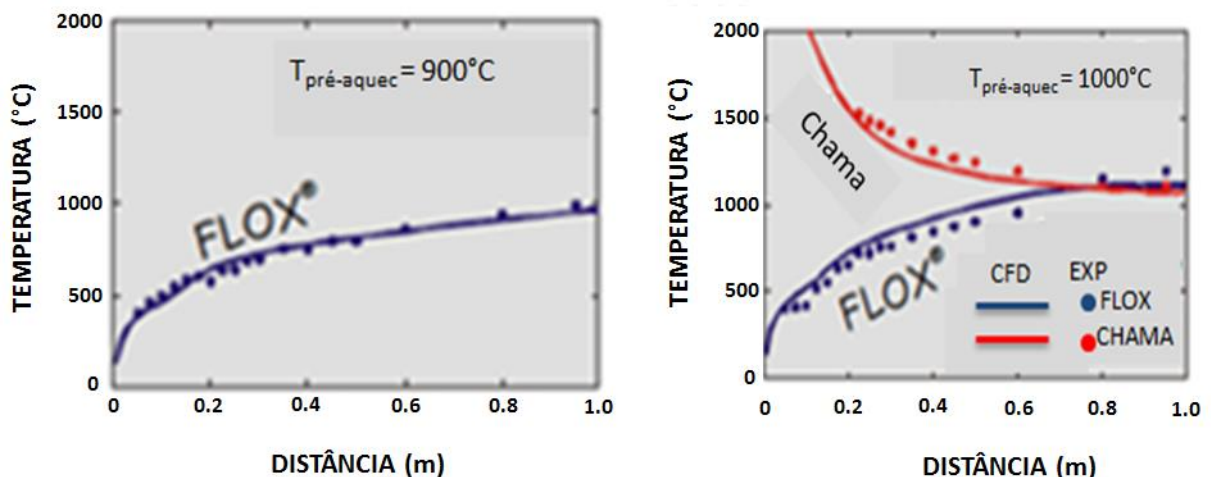


Figura 2.15 – Comparação entre resultados experimentais e numéricos da distribuição de temperatura para o regime de combustão sem chama. Adaptada de Wüning (2005).

Uma análise rápida dos trabalhos presentes na literatura mostra que, na maioria das simulações, a preocupação dos estudiosos está voltada para os modelos que melhor representam o fenômeno de combustão sem chama. Esta discussão se estende até os dias

atuais, pois o interesse é que estes modelos reproduzam com fidelidade os experimentos possibilitando maior entendimento dos fenômenos envolvidos neste regime de combustão e com isso aumentar a eficiência do processo.

Coelho & Peters (2001) simularam numericamente a combustão sem chama com metano como combustível, pré-aquecimento do ar de combustão e alta recirculação dos gases de exaustão. O campo de escoamento foi modelado através de CFD, complementado com o modelo de combustão *steady flamelet laminar*. Para a modelagem da turbulência aplicou-se o modelo k- ϵ e a fração mássica de NO foi levantada em pós-processamento utilizando o modelo EPFM (*Eulerian Particle Flamelet Model*). Os resultados obtidos foram comparados a resultados experimentais disponíveis para o modelo simulado. Os autores concluíram que os valores dos componentes de velocidade média e sua flutuação e o tempo local de residência são aceitáveis, porém com algumas discrepâncias atribuídas à geometria do queimador. Já as emissões de NO apresentaram resultados bastante coerentes quando calculados pelo modelo EPFM.

Orsino et al., (2001) avaliaram o potencial de modelos de combustão disponíveis no CFD aplicados ao regime de combustão sem chama. Foram selecionados três modelos: *Eddy Break-up Model* com mecanismo de reação em dois passos, o modelo EDC e o modelo *PDF/Mixture Fraction Model*. O combustível utilizado foi o gás natural. Todos os modelos reproduziram as principais características do regime de combustão sem chama, porém falharam na descrição do campo de temperatura e das reações químicas presentes na região de injeção do combustível. Segundo os autores uma possível causa para esta falha é o arrasto de uma fraca corrente de combustível interagindo com uma forte corrente de ar de combustão.

Yang & Blasiak (2005) modelaram o regime de combustão sem chama para a queima de gás propano liquefeito. Os modelos FRC (*Finite Rate Chemistry Model*) e EDC encontrados no CFD foram combinados a fim de prever a performance do combustor para esta nova tecnologia de combustão. Os resultados numéricos comparados aos experimentais apresentaram boa concordância, conforme mostrado nas Figuras 2.16 e 2.17 onde se observa que as taxas de emissão de CO e NO apresentam valores numéricos próximos aos medidos experimentalmente.

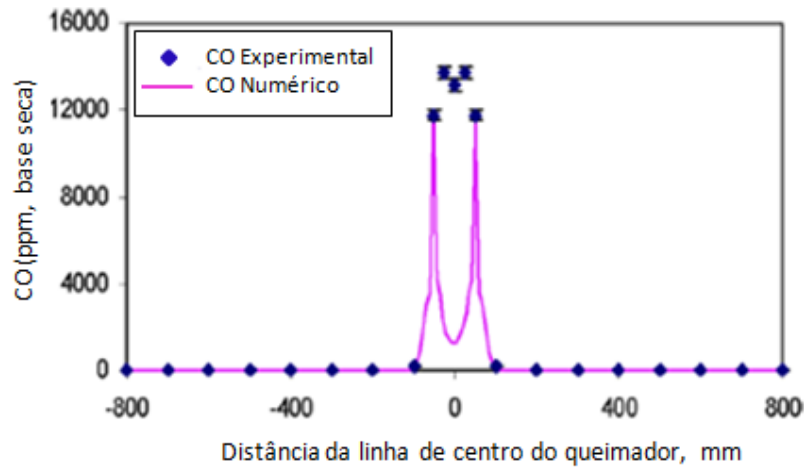


Figura 2.16 – Concentração de CO ao longo do comprimento da câmara de combustão. Yang & Blasiak (2005).

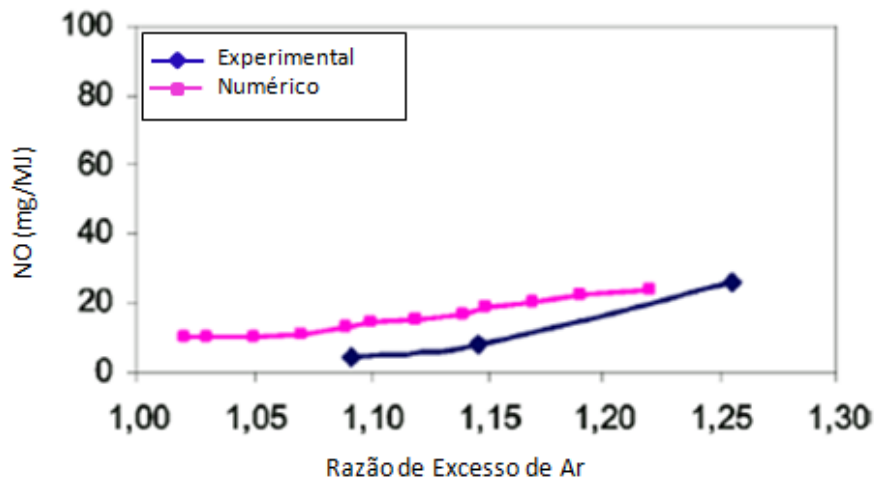


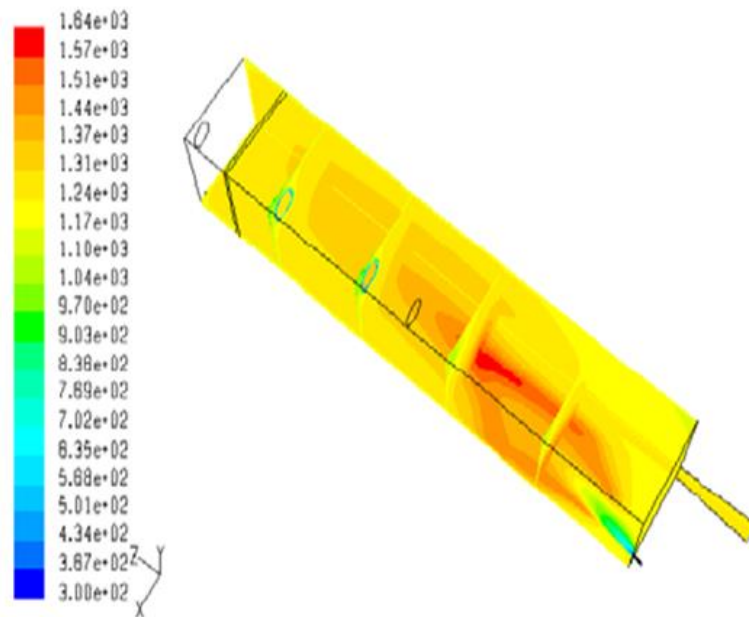
Figura 2.17 – Concentração de NO para diferentes razões de excesso de ar. Yang & Blasiak (2005).

Os autores ainda mostraram que os gradientes de temperatura foram baixos e uma distribuição homogênea da chama ao longo da câmara de combustão, concluindo ao final que a combinação entre os dois modelos citados anteriormente reproduziu satisfatoriamente a combustão sem chama.

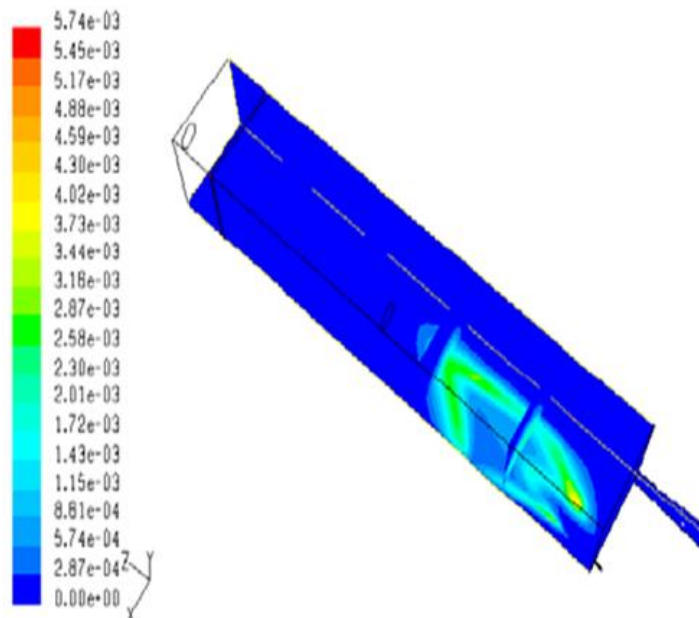
Murer et al., (2005) compararam resultados numéricos e experimentais da queima de gás natural em um queimador de escala laboratorial operando em regime de combustão sem chama. Em sua simulação os autores variaram os modelos de turbulência e utilizaram dois modelos de combustão para confrontar os resultados obtidos em cada um, sendo eles o modelo PDF e o EDM.

Para o modelo de combustão PDF as concentrações locais de CO e o campo de temperatura apresentaram resultados incoerentes, enquanto para o modelo EDM os mesmos dados se mostraram plausíveis com relação ao experimento. Já a mudança entre os modelos

de turbulência não afetou de forma significativa os resultados das simulações, porém a associação entre o modelo de turbulência k- ϵ e modelo de combustão EDM foi mais eficiente. Na Figura 2.18 são destacados o campo de temperatura e a concentração de CO no combustor, nela são observados baixos níveis de emissão de CO e a uma distribuição homogênea de temperatura, de onde se conclui que a associação entre os modelos k- ϵ e EDM reproduziu com eficiência o regime de combustão sem chama.



a) Campo de temperatura



b) Concentração de CO

Figura 2.18 - Distribuição de temperatura e concentração de CO obtidos na simulação numérica utilizando o modelo de turbulência k- ϵ e o modelo de combustão EDM. Murer et al., (2005).

Mancini et al., (2007) investigaram numericamente o processo de injeção de gás natural em uma câmara de combustão de escala semi-industrial operando no regime de combustão sem chama. Eles aplicaram em sua simulação o modelo RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) para turbulência e três submodelos de combustão, sendo eles: *Eddy-Break-up Submodel* com mecanismo de reação em dois passos; o submodelo PDF e submodelo PDF sem flutuações turbulentas. Uma análise experimental deste processo mostrou uma região de combustão convencional ocorrendo no jato de injeção do combustível e o mesmo foi observado na simulação numérica. Os autores não conseguiram reproduzir as características do regime de combustão sem chama e atribuíram isto ao modelo de turbulência RANS que provocou erros na predição do arrasto da corrente de combustível pela corrente de ar de combustão, conforme visto em Orsino et al., (2001), e desconsideraram a influência dos modelos de combustão utilizados.

Parente et al., (2008) avaliaram a eficiência dos modelos de combustão FRC/EDC e EDC e de mecanismos cinéticos Global Chemistry, DRM-19 e GRI-3.0 na simulação numérica da combustão sem chama de metano e mistura de metano e hidrogênio. Ainda foi observada a influência da difusão molecular no regime de combustão. O regime de combustão sem chama foi encontrado para as interações entre os modelos EDC/DRM-19 e EDC/GRI-3.0 (Ver Figura 2.19.c e 2.19.d) enquanto as demais combinações (EDC/FRC/Global Chemistry e EDC/Global Chemistry) produziram chama bem sustentada com altos gradientes de temperatura no combustor e temperaturas máximas próximas à temperatura adiabática de chama (Ver Figura 2.19.a e 2.19.b).

Os autores ainda observaram que o aumento da fração mássica de hidrogênio leva ao aumento da temperatura no interior do combustor para todos os modelos de interação turbulentos/químicos e para os mecanismos cinéticos. Já a difusão molecular não influencia de forma significativa o campo de temperatura e a distribuição das espécies químicas na região de combustão.

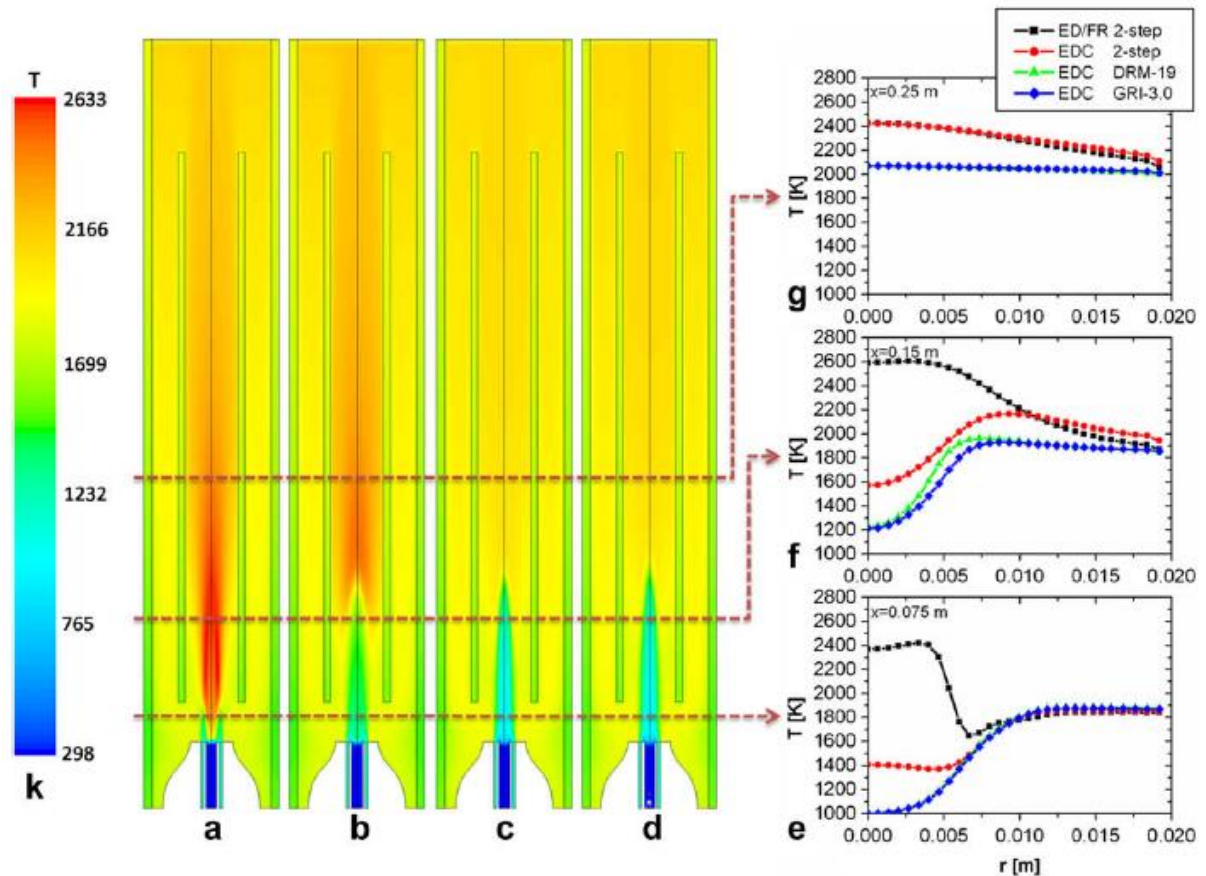


Figura 2.19 - Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para a queima de mistura metano-hidrogênio. (a) EDC/FRC com mecanismo de reação global, (b) EDC com mecanismo de reação global, (c) EDC com DRM-19 e (d) EDC com GRI-3.0. Parente et al., (2008).

Munera et al., (2009) revisaram trabalhos especializados presentes na literatura sobre os modelos mais comuns de turbulência, combustão, transferência de calor e de formação de NO_x na modelagem da combustão sem chama através de códigos CFD. Segundo os autores os modelos mais apropriados são o $k-\varepsilon$ padrão e o $k-\varepsilon$ realizável para a turbulência, os modelos FRC/EDC e EDC para a combustão. Os modelos que melhor reproduzem as características da radiação são o de ordenadas discretas (DO – *Discrete Ordinates*), acompanhado do cálculo do coeficiente de absorção dos gases da combustão e o modelo da soma ponderada de gases cinzentos (WSGGM - *Weighted Sum of Gray Gas Model*). Finalmente para o pós-processamento de NO_x destacam-se os modelos térmico, prompt e N_2O intermediário.

Khoshal et al., (2011) analisaram via CFD a influência da temperatura de injeção do combustível (Metano) na formação de NO_x para um combustor operando em regime de combustão sem chama. Na simulação numérica foram utilizados os modelos RANS e o RNG $k-\varepsilon$ para a turbulência, para a modelagem da radiação houve uma associação entre os modelos DO e o WSGGM. A combustão foi modelada via EDC com mecanismo de reação em dois

passos. Os níveis de emissão de NO_x foram calculados pelo mecanismo N_2O -intermediário. Para validação dos resultados numéricos foi desenvolvido um experimento às mesmas condições da simulação e a comparação entre os resultados obtidos em ambos apresentou boa concordância. A alta temperatura de pré-aquecimento do ar de combustão ($1100\text{ }^\circ\text{C}$) promoveu aumento na temperatura de entrada de combustível resultando em uma região de combustão homogênea e bem distribuída no interior da câmara de combustão e baixas emissões de NO_x . Na Figura 2.20 observa-se que o aumento na temperatura da injeção de combustível reduz significativamente a emissão de NO_x no processo de combustão (Ver Figura 2.20.a). Outra análise feita foi a relação entre o aumento da temperatura de injeção de combustível e a máxima temperatura de chama atingida. Observando a Figura 2.20.b nota-se que as temperaturas máximas atingidas no interior da câmara de combustão mantêm-se dentro dos limites para o regime de combustão sem chama com valor em torno de $1600\text{ }^\circ\text{C}$ para temperatura de aquecimento do combustível em torno de $800\text{ }^\circ\text{C}$.

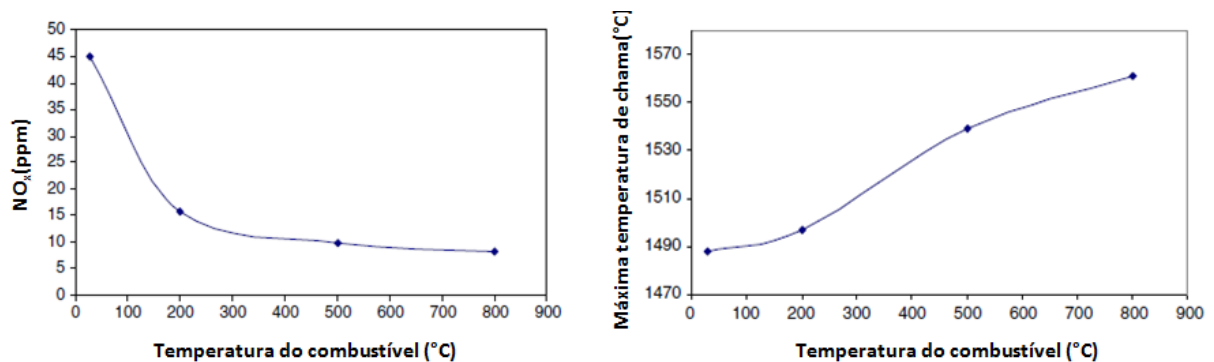


Figura 2.20 – Emissões de NO_x e máxima temperatura de chama em função da temperatura de injeção de combustível. Khoshal et al., (2011).

Dias (2014) apresentou a análise numérica via CFD do regime de combustão sem chama em uma fornalha tendo por base experimental o trabalho de Veríssimo (2011). Em sua tese o autor pesquisou quais os melhores modelos de turbulência, combustão, radiação e mecanismos de reação mais apropriados para reprodução do regime de combustão sem chama para o caso em estudo apontando ainda detalhes que podem ser modificados no experimento para obter maior eficiência. Foram realizadas oito simulações combinando os seguintes modelos turbulência/combustão_mecanismo de reação/radiação, conforme segue: 1^a.) KES/EDC_1 step/DO; 2^a.) KER/EDC_1 step/DO; 3^a.) KER/EDC_2 steps/DO; 4^a.) KER/EDC_GRIMech3.0/DO; 5^a.) KER/EDC_KEE58/DO; 6^a.) KER/EDCMod_KEE58/DO; 7^a.) KER/FRED_2 steps/DO; 8^a.) KER/FREDMod 2 steps/DO.

O autor mostrou que para os modelos globais 1step e 2steps (1^a, 2^a e 3^a simulações) as temperaturas obtidas foram maiores em relação às temperaturas experimentais e às demais

simulações realizadas levando a valores elevados nas emissões de NO_x . Na quarta simulação utilizou-se o modelo EDC com química detalhada GRIMech3.0 o que provocou uma diminuição nos valores de temperatura em relação às primeiras simulações e os níveis de emissão de NO_x apresentaram valores mais coerentes. Já os níveis de CO ficaram superiores aos experimentais. Para a cinética KEE58 os resultados permaneceram próximos aos obtidos com o GRIMech3.0, porém os perfis de temperatura, de O_2 e CO_2 apresentaram um pequeno afastamento. Mas uma análise de tempo computacional gasto para cada modelo mostra que a cinética KEE58 é muito mais viável, pois o tempo de simulação deste é cerca de 1/3 do tempo gasto quando se utiliza o GRIMech3.0, que é de 380 horas.

De forma geral o autor mostrou que os modelos disponíveis no CFD reproduziram as características do regime de combustão sem chama satisfatoriamente e que a análise numérica deste novo regime de combustão exige um procedimento específico. Os resultados gerados mostram também que a ferramenta CFD apresenta um potencial muito grande para este tipo de análise contribuindo para aperfeiçoamento dos sistemas convencionais disponíveis.

2.1.5 - Abordagem Numérica Para Combustíveis Líquidos

As simulações numéricas do regime combustão sem chama de combustíveis líquidos é uma prática recente sendo encontradas na literatura poucas pesquisas sobre o assunto. Na sequência desta revisão serão abordados estes trabalhos, mostrando suas principais características como a modelagem da injeção deste tipo de combustível e quais os modelos de turbulência e combustão considerados mais adequados até o presente momento para a combustão sem chama de combustível líquido.

Rochaya (2007) desenvolveu em sua tese um modelo numérico para combustão de escoamentos bifásicos de sprays de combustíveis líquidos. A primeira parte do estudo foi dedicada à investigação da estrutura do escoamento gerada por um injetor do tipo “swirl” para diferentes combustíveis, na segunda parte o autor avaliou o desempenho da ferramenta CFD na simulação deste tipo de problema e estudou meios de aperfeiçoar os resultados obtidos. Inicialmente foi realizado um experimento onde foram levantados os tamanhos de gota gerados pelo spray e os campos de velocidade e temperatura do escoamento a fim de obter dados iniciais para a simulação numérica em CFD e resultados experimentais para validação da mesma. Na simulação o autor utilizou o modelo de turbulência RSM, que se adapta bem a escoamentos em sprays do tipo swirl, as gotas foram incluídas diretamente através de uma superfície de entrada, que para o tipo de spray estudado gera o escoamento desejado, também foi aplicado o modelo de evaporação disponível no código ANSYS FLUENT para transformação de gotas em vapor de combustível a fim de tornar possível a mistura entre os

reagentes para combustão, a transferência de calor e massa resultante do processo de vaporização das gotas foi calculada através das correlações de Ranz-Marchall e para a combustão utilizou-se o modelo *flamelet* laminar com PDF integrado. Os mecanismos de reação foram elaborados através do OPPDIF no CHEMKIN-CFD que para o etanol resultou em um mecanismo de combustão com 56 espécies e 351 reações.

Para a combustão do spray de etanol o autor observou que a taxa de evaporação foi superestimada e justifica este fato na utilização da correlação de Ranz-Marshall para predição dos efeitos convectivos, afirmando ser necessária a aplicação de modelos de evaporação mais precisos para este tipo de simulação. A superestimação da taxa de evaporação afeta diretamente a temperatura de chama, que é subestimada nas proximidades do injetor de combustível e os valores obtidos apresentam discrepâncias em relação aos resultados experimentais. Foi encontrado também na simulação numérica um pico local de temperatura pronunciado que não apareceu nos experimentos. Este problema foi associado a falhas no modelo de combustão *steady flamelet*. Porém, outras características da combustão do spray de etanol foram reproduzidas com precisão como a temperatura na linha de centro do spray, que é de difícil predição por depender fortemente das condições iniciais de injeção do combustível. A influência do tamanho de gota também foi analisada e observou-se que gotas de menores diâmetros vaporizam mais rapidamente gerando uma região de mistura rica nas proximidades do injetor, diminuindo a temperatura de chama durante a combustão. Um aumento no tamanho das gotas faz com que estas passem sem vaporizar por uma zona primária onde sofrem um processo de quebra, porém não vaporizam resultando em uma mistura pobre na região do injetor, diminuindo consideravelmente a eficiência do processo. De forma geral o autor concluiu que a ferramenta numérica ANSYS FLUENT reproduziu bem a combustão de sprays, mas afirma que uma análise mais aprofundada dos modelos de combustão e da discretização do campo de escoamento das gotas para formação do spray deve ser realizada a fim de se obter maior precisão nos resultados.

Bekdemir (2008) simulou a combustão convencional de spray de óleo diesel. O diesel é injetado sobre pressão na câmara de combustão formando o spray. As simulações numéricas foram realizadas no ANSYS FLUENT. O spray foi modelado pelo modelo de fase discreta (DPM – Discret Phase Model) e a combustão através da biblioteca *flamelet* com PDF integrado. Os resultados numéricos obtidos não se aproximaram dos dados experimentais disponíveis para a simulação. O autor observou que o combustível auto ignitou muito cedo e que a temperatura máxima atingida na combustão foi muito baixa, estes problemas foram justificados pela associação da biblioteca *flamelet* e o PDF.

Zhu et al., (2011) modelaram a combustão de spray turbulento de metanol. Os resultados obtidos foram validados com dados experimentais disponíveis para a simulação. O metanol foi injetado na câmara de combustão já em forma de gotas e para geração do spray foi utilizado o DPM através do modelo de quebra primária de gotas LISA (Do inglês: *Linearized Instability Sheet Atomization*) indicado para simulações com injetores do tipo swirl. Dados como densidade do número de gotas, diâmetro sauter médio da gota (SMD), o campo de velocidades do escoamento relacionado ao spray foram levantados e por fim foi realizada uma análise da influência do termo fonte de variação da fração de mistura entre a fase dispersa (gotas de metanol) e a fase contínua (ar) que surge devido ao processo de evaporação das gotas no processo de combustão. Para a modelagem da turbulência e da combustão foram considerados os modelos k- ϵ e *flamelet laminar* com mecanismo de reação detalhado (32 espécies e 167 reações, desenvolvido por R. P. Lindstedt e MP), respectivamente.

Os autores mostraram que os resultados obtidos com e sem o termo fonte de variação da fração de mistura foram muito próximos e não houve diferença considerável no campo de escoamento da mistura entre a fase contínua e a fase discreta. A presença do termo fonte promoveu um aumento de temperatura de apenas 10 K com relação aos resultados sem o termo fonte, o que não afetou significativamente a estrutura e as características da chama. Já o campo de velocidades apresentou um desvio significativo frente aos resultados experimentais. Segundo os autores esta diferença é resultado de erros numéricos, pois foi observado que a interação entre as fases contínua e dispersa é superestimada na simulação do spray pelo DPM. Outras possíveis causas são a aceleração da fase contínua pelo spray e a expansão térmica da mesma que juntas geram altas velocidades tornando difícil a predição das componentes da velocidade da fase gasosa em regiões de alta concentração da fase dispersa.

Jenny et al., (2012) realizou uma revisão bibliográfica abordando os principais conceitos e características da modelagem computacional da combustão de sprays turbulentos. Os autores discutem em seu trabalho a parte teórica associada aos modelos numéricos utilizados em simulações. O estudo é dividido em duas partes, onde a primeira trata das características da interação entre fases no spray turbulento, por exemplo: distribuição, concentração, fração de mistura, diâmetro médio, evaporação e o processo de quebra de gotas. Já a segunda parte reúne informações sobre os tipos de abordagem numérica para turbulência LES, DNS e RANS e os modelos de combustão *flamelet*, PDF e CMC. O conteúdo do trabalho por ser extenso não é apresentado neste texto, porém é explicitado por ser uma importante base teórica para desenvolvimento da presente tese.

Li et al., (2014) elaboraram um código para simulação da combustão de spray turbulento de etanol adotando para a turbulência a abordagem LES variando os modelos de turbulência e combustão (SGS-k-equation, Finite Rate Combustion). O código desenvolvido recebeu o nome de KIVA-LES e foi baseado no código já existente KIVA-RANS. O código numérico reproduziu com êxito a combustão do spray de etanol para as combinações entre os modelos LES/SGS-k-equation e LES/Finite Rate Combustion, gerando resultados numéricos muito próximos aos dados experimentais disponíveis para este estudo. Outra comparação foi realizada com os valores disponíveis para as simulações pelo código KIVA-RANS com modelo de combustão PDF e os autores observaram que o KIVA-LES gera resultados muito mais precisos.

Um trabalho recente que aborda a simulação numérica da combustão sem chama de spray turbulento de etanol foi realizado por Jamali (2014). Em sua tese ele utilizou um injetor do tipo swirl para geração do spray de etanol e as simulações foram desenvolvidas no ANSYS FLUENT. Na modelagem da turbulência foram aplicados os modelos k- ϵ standard e realizável e o RSM. Para a combustão foram selecionados os modelos *steady flamelet* e o FGM (*Flamelet Generated Manifold*) e a radiação foi simulada através dos modelos DO e P1 associados ao modelo WSGGM para o cálculo dos coeficientes de absorção. O spray de etanol foi modelado pelo DPM, as partículas fluidas foram injetadas na câmara de combustão em forma de cone com ângulo médio de 40° e ângulo de dispersão de 20° e ainda foi considerado para o estudo o modelo de quebra primária de partículas LISA, que reproduziu melhor as características do spray. As medições foram feitas por uma relação entre a posição radial para cada elevação acima da linha de centro do injetor (R), a posição axial (x) e o seu respectivo ângulo (α), conforme apresentado na Figura 2.21.

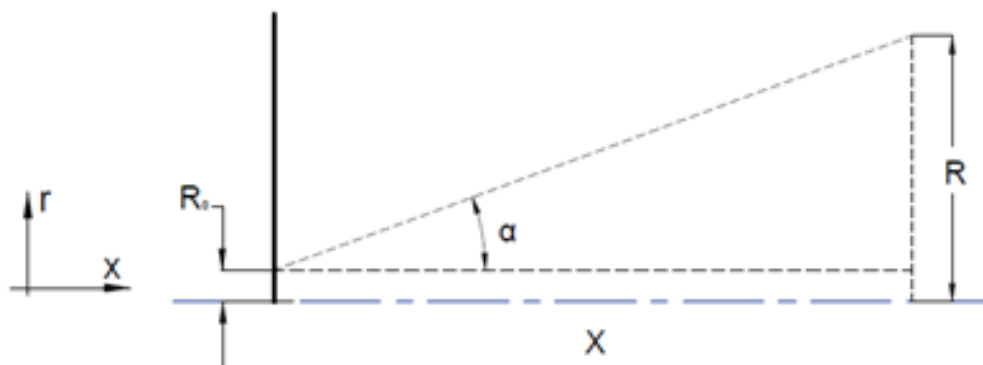


Figura 2.21 – Relação entre as posições radial, axial e o ângulo α . Jamali (2014).

O primeiro modelo de combustão analisado foi o *steady flamelet*. Na Figura 2.22 está representada a distribuição de velocidade axial da fase gasosa para os modelos de turbulência RSM, k- ϵ standard e realizável. Os resultados apresentaram boa concordância com os dados

experimentais disponíveis para esta simulação. A distribuição de velocidade radial também se manteve próxima à experimental, porém o autor observou que há problemas na medição desta velocidade a baixas elevações, como por exemplo, para $x = 10$ mm (Ver Figura 2.23).

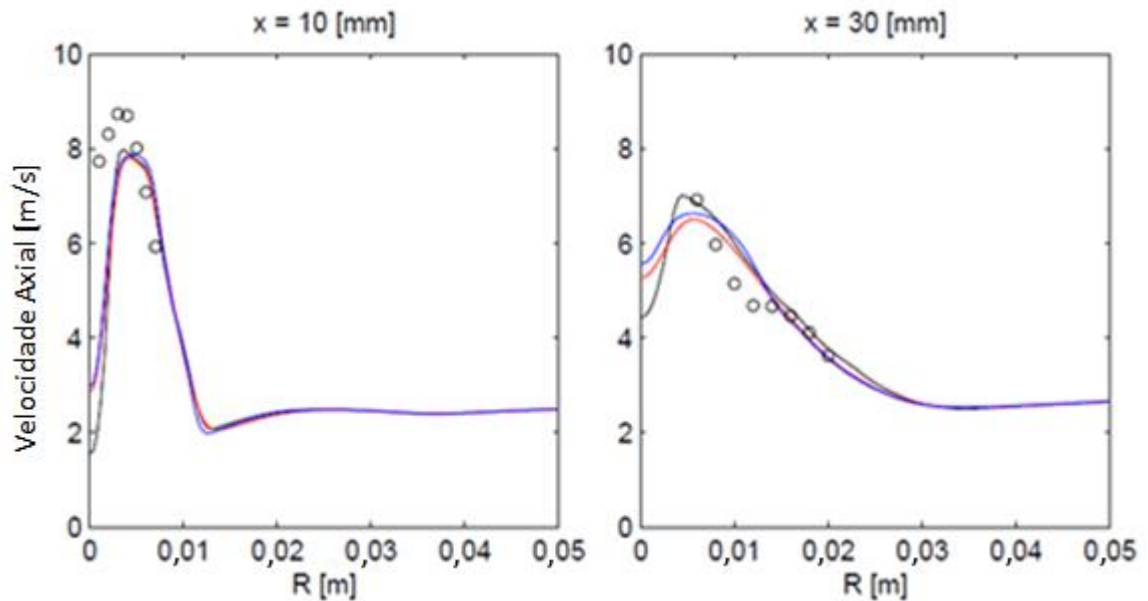


Figura 2.22 – Distribuição de velocidade axial da fase gasosa para o modelo *steady flamelet*. (° - Experimento; -- RSM; - - $k-\epsilon$ standard; - - $k-\epsilon$ realizável). Jamali (2014).

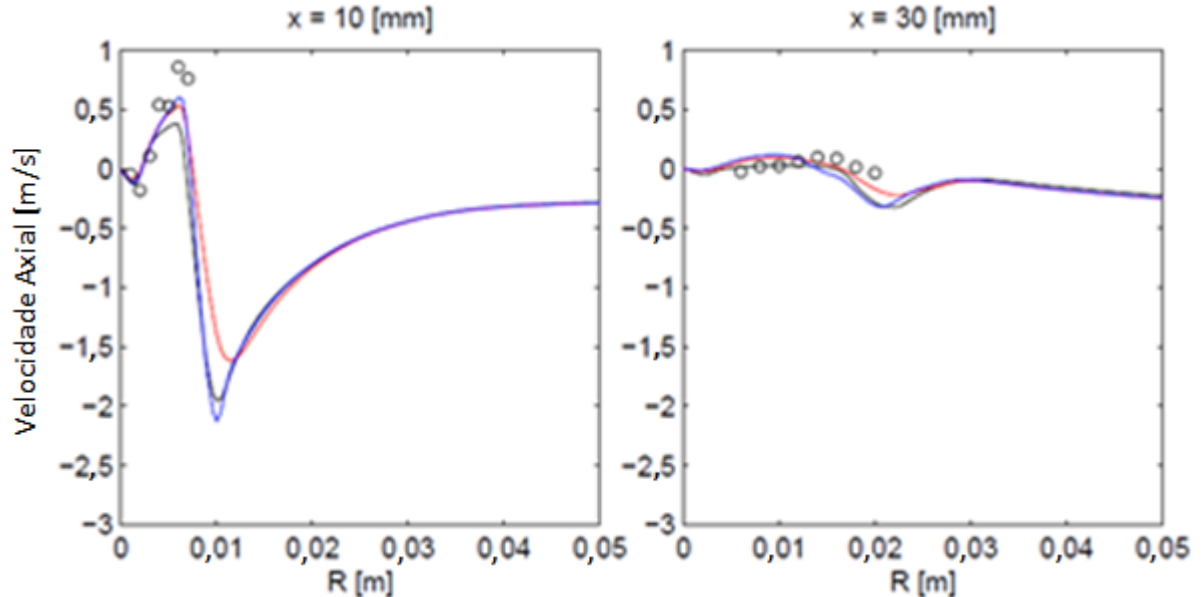


Figura 2.23 – Distribuição de velocidade radial da fase gasosa para o modelo *steady flamelet*. (° - Experimento; -- RSM; - - $k-\epsilon$ standard; - - $k-\epsilon$ realizável). Jamali (2014).

A distribuição de temperatura foi medida nos pontos $x = 15$ mm e $x = 40$ mm (Ver Figura 2.24). Para os três modelos de turbulência os valores numéricos condizem com os experimentais, porém dois pontos nas curvas merecem atenção. O primeiro é um ponto mínimo de temperatura que, segundo o autor, está relacionado ao modelo de evaporação

disponível no ANSYS FLUENT. O processo de evaporação das gotas de combustível na simulação numérica foi muito mais rápido que a evaporação que ocorre nos experimentos. O segundo são os picos de temperatura atingidos na modelagem. Os modelos RSM e $k-\epsilon$ realizável superestimam o valor máximo de temperatura enquanto o modelo $k-\epsilon$ standard subestima este valor. Este comportamento é devido à taxa de dissipação escalar que é função da fração de mistura entre as fases contínua (gasosa) e dispersa (partículas fluidas de combustível) e das variáveis da turbulência que afetam diretamente o campo de temperatura da chama e sua estrutura.

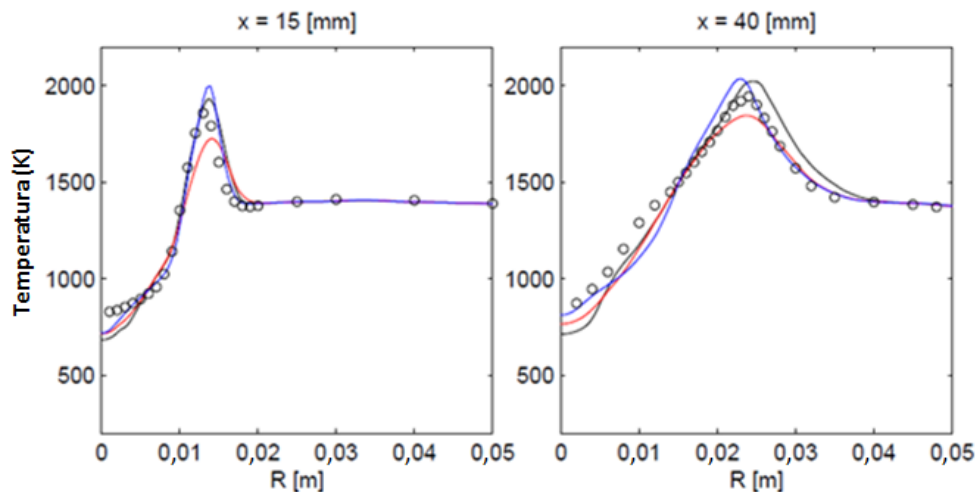


Figura 2.24 – Distribuição de velocidade axial da fase gasosa para o modelo *steady flamelet*.

(° - Experimento; - - RSM; - - $k-\epsilon$ standard; - - $k-\epsilon$ realizável). Jamali (2014).

O segundo modelo investigado foi o FGM e os resultados obtidos foram muito próximos aos experimentais bem como aos gerados pelo modelo *steady flamelet*. O modelo de turbulência $k-\epsilon$ apresentou comportamento semelhante para os dois modelos de combustão, enquanto os demais modelos de turbulência para mesmas elevações (regiões onde são tomadas as medidas) reproduziram perfis de temperatura com uma diferença considerável, acima de 300 K, entre o eixo e os picos de temperatura. Outro ponto importante a ressaltar é o comportamento do perfil de temperatura para o modelo RSM, que diminui e aumenta rapidamente nas proximidades do eixo, como se observa na Figura 2.25.

A Figura 2.26 representa a concentração de radical hidroxila (OH), um dos melhores indicadores para diagnóstico de chama segundo Veríssimo (2011), na chama produzida pelos dois modelos de combustão. O modelo FGM reproduziu corretamente duas zonas de combustão com distribuição homogênea de radicais OH e sua baixa concentração mostra que não houve formação de chama concentrada ao longo da câmara (Ver Figura 2.26.a) caracterizando o regime de combustão sem chama. Já o modelo *steady flamelet* gerou apenas uma zona de reação onde se observa alta concentração de radicais OH nas proximidades do

injetor que corresponde a uma chama bem ancorada, ou seja, o regime de combustão convencional (Ver Figura 2.26.b).

O autor conseguiu em seu trabalho reproduzir o regime de combustão sem chama para o modelo FGM. Este modelo segue os mesmos parâmetros do *steady flamelet*, porém com duas diferenças. A primeira é que o *steady flamelet* resolve as equações envolvidas no processo de combustão entre a taxa de dissipação escalar no equilíbrio com a taxa de dissipação escalar máxima até o ponto de extinção da chama. O FGM calcula as equações após este ponto quando as reações se tornam instáveis até atingir a linha de mistura. A segunda diferença é que o *steady flamelet* ignora as flutuações da taxa de dissipação escalar, já o FGM integra a forma β PDF considerando estas flutuações. Estas novas características deste modelo podem ser as possíveis responsáveis pelo melhor desempenho do mesmo frente ao modelo *steady flamelet*.

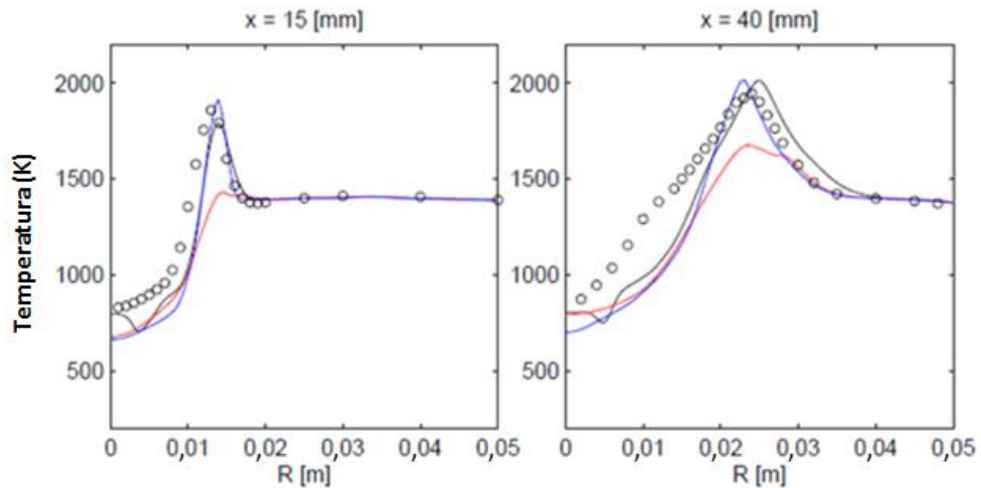


Figura 2.25 - Perfis de temperatura para o modelo de combustão FGM. (° - Experimento; -- RSM; - - $k-\varepsilon$ standard; - - $k-\varepsilon$ realizável). Jamali (2014).

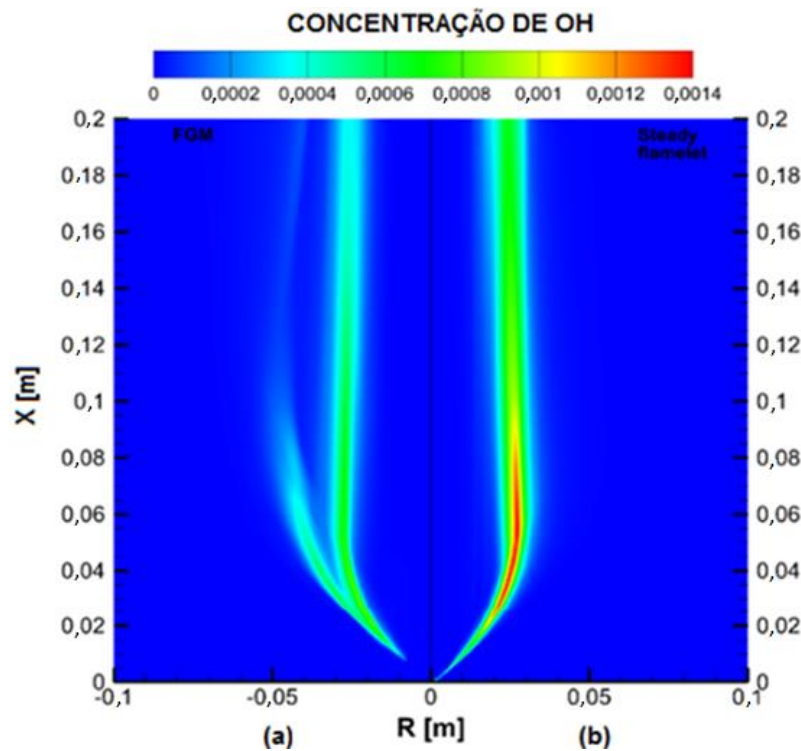


Figura 2.26 – Concentração de radicais OH na chama para os seguintes modelos: (a) FGM e (b) *Steady Flamelet*. Adaptada de Jamali (2014).

Uma visão geral dos trabalhos discutidos nesta revisão mostra que as pesquisas envolvendo a combustão sem chama de combustíveis líquidos ainda está em fase de desenvolvimento. Os modelos de turbulência e combustão apresentados são limitados, tendo em vista à variedade de modelos disponíveis na ferramenta numérica ANSYS CFX para este tipo de modelagem, principalmente no que diz respeito à queima de etanol hidratado. Outro ponto importante de ressaltar é que o spray do tipo blurry ainda não foi modelado sendo necessário um estudo detalhado sobre este tipo de injeção.

Sendo assim a seguinte tese aborda estes dois pontos onde o primeiro é a modelagem do spray turbulento gerado pelo injetor blurry para análise do comportamento do escoamento de gotas no interior da câmara de combustão e sua influência no processo de combustão e o segundo ponto é a modelagem da turbulência e da combustão para obtenção do regime de combustão sem chama utilizando o etanol hidratado como combustível de forma a contribuir para o entendimento dos fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos que se desenvolvem neste processo.

Capítulo 3

MÉTODO DE SOLUÇÃO: DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

No Capítulo 3 é apresentada a formulação matemática para o estudo da Combustão Sem Chama para a queima de combustíveis líquidos. A combustão de sprays combustíveis líquidos envolve uma série de fenômenos físicos químicos e termodinâmicos como turbulência, transferência de calor, mecanismos de reação química, atomização, evaporação dentre vários outros que devem ser modelados cuidadosamente para reprodução mais próxima possível dos processos reais. No presente trabalho os estudos se concentraram na modelagem de turbulência, combustão, radiação e na modelagem do spray de etanol hidratado.

A modelagem de turbulência segue a metodologia RANS com os modelos k- ϵ standard e RNG k- ϵ . Os modelos de combustão aplicados são o EDC, o FRC e o FRC/EDC e para radiação será testado inicialmente DT (*Discrete Transfer*). Finalmente para a modelagem do spray foi escolhido o modelo de fases discretas, DPM. Para modelagem da reação de combustão foi utilizado o mecanismo de reação com 70 reações elementares e 26 principais espécies químicas para a reação etanol/ar proposto por Verma (2004) e foi escolhido por permitir analisar as emissões de gases CO e NO no processo de forma direta,.

Toda a formulação apresentada é baseada nos guias teóricos para modelagens realizadas no ANSYS CFX e handbooks (Sirigano, 2010; Gutheil, 2011) sobre a modelagem de escoamentos reativos e não reativos de sprays turbulentos.

3.1 – Equações Governantes do Problema

Os princípios de conservação que governam o problema estudado na presente tese, a combustão sem chama de combustíveis líquidos, são três: o Princípio de Conservação da Massa, o Princípio de Conservação da Quantidade de Movimento e o Princípio de Conservação de Energia. Para o caso de escoamentos envolvendo mistura de espécies ou reações, uma nova equação de transporte para representação da produção e do consumo de espécies é inserida ao problema.

Os princípios de conservação citados anteriormente estão representados nas Equações (3.1) a (3.4).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

Onde ρ é a massa específica do fluido.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \nabla \cdot (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (3.2)$$

Na Equação (3.2) o termo “ p ” é a pressão estática, “ T_{ij} ” é a parte viscosa do tensor de pressão dado pela Equação (3.2.a) e ρg_i é a soma das forças de contato agindo no fluido.

$$T_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{2}{3} \mu \frac{u_k}{x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.2.a)$$

Onde μ é a viscosidade molecular.

A Equação (3.3) corresponde ao princípio de conservação da energia escrito em termos de entalpia, h .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + Q \quad (3.3)$$

Onde q_j é o fluxo difusivo e Q é um termo fonte correspondente às perdas ou ganhos sofridas pelo volume de controle que podem ser por calor, radiação, mudança de fase ou outros tipos de transferência que venham a ocorrer no sistema.

Como as análises no presente trabalho envolvem um escoamento multifásico onde uma fase líquida, em forma de gotas, se encontra dispersa em uma fase contínua gasosa, é necessária uma equação de transporte extra para descrever a produção e o consumo das espécies (Y), dada pela Equação (3.4).

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_k u_j) = - \frac{\partial J_{k,j}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (3.4)$$

O termo $\dot{\omega}_k$ determina a taxa de consumo ou de produção de espécies e $J_{k,j}$ é o fluxo de calor.

3.2 – Modelagem da Turbulência

As equações que governam a combustão de sprays de combustíveis líquidos são todas influenciadas pelo fenômeno da turbulência. Em escoamentos turbulentos, como o spray gerado pelo injetor blurry ou o escoamento da fase contínua a altas velocidades, há uma complexidade física resultante do espectro de escalas do escoamento que possuem interações lineares entre elas (Bimbato, 2012).

Em escoamentos multifásicos a presença de partículas líquidas com escalas de comprimento maiores que as de Kolmogorov e com fração volumétrica menor que 2.5×10^{-6} influenciam o espectro de turbulência alterando as taxas de transporte de massa e quantidade de movimento (Jenny et al., 2012). Portanto o estudo dos fenômenos e mecanismos resultantes das interações turbulentas entre as fases do escoamento são de extrema importância.

Porém o alto grau de complexidade que surge neste tipo de escoamento dificulta a solução das equações governantes apresentadas na seção anterior e para resolvê-las lança-se mão de ferramentas numéricas como o CFD que dispõe de várias técnicas para simulação da turbulência. Para escoamentos turbulentos reativos estas ferramentas apresentam três abordagens e são elas: Simulação Numérica Direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*), Simulação de Grandes escalas (LES – *Large Eddy Simulation*), e Equações Médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations*).

A Simulação Numérica Direta é um dos métodos mais precisos para a simulação da turbulência nos fluidos. Para isso é necessária a discretização do domínio através de uma malha bem refinada onde as equações de Navier-Stokes são resolvidas diretamente com alta precisão nos resultados obtidos sem necessidade de modelagem das escalas do escoamento. Porém esta eficiência implica em alto custo computacional, principalmente quando se trata de escoamentos reativos, restringindo sua aplicação a problemas mais simples de engenharia.

A Simulação de grandes escalas (LES) é uma técnica muito comum para a simulação de escoamentos turbulentos onde as grandes escalas do escoamento são simuladas explicitamente e as pequenas escalas são modeladas implicitamente utilizando um modelo de escala submalha (SGS model – *subgrid-scale model*). Esta se adapta bem a escoamentos

reativos reproduzindo satisfatoriamente fenômenos como instabilidades da combustão, variações ciclo-a-ciclo em motores a combustão interna que influenciam a eficiência do processo e taxa de emissão de poluentes. Como a utilização da técnica DNS é muito cara em termos de tempo computacional, a metodologia LES se apresenta como uma boa alternativa envolvendo menor tempo computacional e eficiente na reprodução de problemas práticos da engenharia no ambiente industrial.

Por fim a abordagem via Equações Médias de Reynolds (RANS) consiste na aplicação de uma técnica matemática denominada decomposição de Reynolds que separa as grandezas do escoamento em uma parte média e outra flutuante, as equações resultantes são submetidas à operação de média e as perturbações são definidas de tal forma que sua média no tempo é igual a zero. A equação resultante apresenta um termo não linear denominado como tensões de Reynolds que devem ser determinadas para o fechamento do sistema de equações da turbulência. Esta metodologia é mais aplicada a estudos envolvendo escoamentos reativos e em análises em CFD gera uma aproximação suficiente para a modelagem da turbulência (Dias, 2014).

O presente trabalho utiliza a abordagem RANS e tendo em vista os modelos de turbulência empregados nas simulações numéricas, será apresentada uma discussão mais detalhada desta abordagem.

3.2.1 – Equações Médias de Reynolds (RANS)

A grande maioria dos problemas práticos de engenharia envolvendo escoamentos reativos é de natureza turbulenta e a solução destes sempre foi questionada por pesquisadores.

Uma das propostas para solucionar estes tipos de problemas foi idealizada por Reynolds em 1894 que propôs um processo de decomposição das equações governantes de forma a analisar o comportamento médio do escoamento e modelar suas flutuações.

Dentre os métodos propostos para solução do problema do fechamento da turbulência encontra-se a metodologia RANS, onde uma determinada variável do escoamento é decomposta em uma parte média temporal e outra correspondente a sua parte flutuante, processo este conhecido como decomposição de Reynolds e representado na Equação 3.5.

$$f(\mathbf{x}, t) = \bar{f}(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t) \quad (3.5)$$

Nas Equações (3.6) e (3.7) é aplicada a decomposição de Reynolds às variáveis do escoamento velocidade e pressão para exemplificar este processo.

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (3.6)$$

$$p = \bar{p} + p' \quad (3.7)$$

Onde u_i e p representam a velocidade instantânea e a pressão do escoamento, \bar{u} e \bar{p} são os valores médios da velocidade e da pressão e u'_i e p'_i são as flutuações de velocidade e pressão.

Aplicando a decomposição de Reynolds aos princípios de conservação da massa e da quantidade de movimento, obtêm-se as Equações (3.8) e (3.9).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i) = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] + \frac{\partial (-\rho \overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j} \quad (3.9)$$

Na Equação (3.9) o termo $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ é denominado Tensor de Reynolds compreendendo aos componentes das flutuações de velocidade desconhecidos e é através deste termo que é modelada a transferência de energia entre todo o espectro de frequências e o escoamento médio. δ_{ij} é o delta de Kronecker.

As Equações (3.3) e (3.4) são submetidas à decomposição de Reynolds e o resultado delas é combinado conforme apresentado na Equação (3.10).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \overline{u \phi_k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{\phi_k u_j}) = -\frac{\partial \overline{J_{k,j}}}{\partial x_i} + \rho \bar{S}_k - \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{\phi'_k u'_j}) \quad (3.10)$$

Onde o termo $\overline{\phi'_k u'_j}$ é denominado fluxo escalar turbulento e $\rho \bar{S}_k$ é o termo fonte que determina a produção ou consumo de espécies bem como perdas e ganhos no escoamento que requer muita atenção ao ser modelado por carregar consigo uma alta não linearidade e por provocar mudanças significativas nas flutuações locais de temperatura (Jamali, 2014).

3.3 – Modelos de Turbulência

A modelagem da turbulência consiste na solução do tensor de Reynolds que resulta, no caso do presente trabalho, do processo de decomposição de Reynolds levando ao famoso problema do fechamento da turbulência.

Uma das metodologias para solução deste problema foi idealizada por Boussinesq que propôs modelar o tensor de Reynolds através do conceito de viscosidade turbulenta. A seguir na Equação (3.11) é representado o modelo de fechamento para o tensor de Reynolds.

$$\overline{-u_i u_j} = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (3.11)$$

Onde k é a energia cinética turbulenta. O delta de Kronecker δ_{ij} surge devido à necessidade de compatibilizar a definição de k com a soma do traço do tensor de Reynolds modelado através da hipótese de Boussinesq. ν_t ($\nu_t = \mu_t / \rho$) é a viscosidade turbulenta, uma propriedade do escoamento que depende da natureza do mesmo gerando uma forte não linearidade na solução das equações (Silveira Neto, 1991).

Os modelos de turbulência são classificados de acordo com a dependência ou não do conceito de viscosidade turbulenta. Para os dois grupos um passo muito importante é obter as equações de transporte adicionais para o cálculo da viscosidade turbulenta ou para o fechamento alternativo das equações médias de Reynolds. Devido ao tipo de simulação desenvolvida no presente trabalho serão citados aqui apenas os modelos que dependem do conceito de viscosidade turbulenta.

3.3.1 – Modelos a Zero Equações de Transporte

Estes são os modelos de turbulência mais básicos que calculam a viscosidade turbulenta, μ_t , de forma global através da velocidade média e de uma escala de comprimento geométrica característica do problema utilizando uma fórmula empírica. No ANSYS CFX a μ_t é modelada como um produto de uma escala de velocidade turbulenta, U_t , e uma escala de comprimento turbulenta, l_t , proposta por Prandtl e Kolmogorov e por fim para relacionar estes termos utiliza-se uma constante de proporcionalidade f_μ (Ver Equação (3.12)).

$$\mu_t = \rho f_\mu U_t l_t \quad (3.12)$$

Na Equação (3.12) a escala de velocidade considerada é a velocidade máxima do fluido no domínio e a escala de comprimento é dada pela Equação (3.13).

$$l_t = (V_D^{1/3})/7 \quad (3.13)$$

Onde V_D é o volume do domínio fluido.

Neste tipo de modelagem observa-se que não há equações de transporte adicionais a serem resolvidas, sendo então denominados “modelos a zero equações de transporte”. Estes modelos têm fundamentos físicos muito pobres não sendo recomendados para solução de escoamentos envolvendo combustão (ANSYS INC., 2011).

3.3.2 – Modelos a Uma Equação de Transporte

Como a própria denominação diz, neste tipo de modelagem uma equação de transporte turbulenta é resolvida. Assim como nos modelos a zero equação de transporte a viscosidade turbulenta resultante depende de uma velocidade e de um comprimento característicos do escoamento.

Neste modelo busca-se o cálculo de uma das grandezas características da turbulência, necessárias para a obtenção da viscosidade turbulenta. Geralmente a grandeza calculada é a energia cinética turbulenta, através da qual é obtida a velocidade característica dada por $\vec{V} = \sqrt{k}$, onde $k = 1/2(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$ é a energia cinética turbulenta (Silveira Neto, 1991).

O modelo Spalart-Allmaras é o mais comum representante desta classe de modelos, ele resolve uma equação de transporte para a viscosidade turbulenta e requer menos esforço computacional. Foi desenvolvido especificamente para aplicações aeroespaciais envolvendo escoamentos com paredes e gradientes adversos de pressão. A variável transportada por este modelo é $\tilde{\nu}$ que é determinada através da equação de transporte dada pela Equação (3.14).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{\nu}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\tilde{\nu}u_i) = \rho c_{b1}\tilde{S}\tilde{\nu} + \frac{1}{\sigma_{\tilde{\nu}}}\left[\frac{\partial}{\partial x_j}\left\{(\mu + \rho\tilde{\nu})\frac{\partial\tilde{\nu}}{\partial x_j}\right\} + \rho c_{b2}\left(\frac{\partial\tilde{\nu}}{\partial x_j}\right)^2\right] - \rho c_{w1}f_w\frac{\tilde{\nu}}{d^2} \quad (3.14)$$

Determinado o valor de $\tilde{\nu}$ é possível então calcular a viscosidade turbulenta μ_t pela Equação (3.15).

$$\mu_t = \rho\tilde{\nu}f_{v1} \quad (3.15)$$

Na Equação (3.15) o primeiro termo do lado direito corresponde ao termo geração, o segundo termo é denominado termo difusão e o terceiro termo é o termo destruição.

3.3.3 – Modelos a Duas Equações de Transporte

Os modelos a duas equações de transporte são utilizados para simulação de diversos tipos de escoamentos por oferecer vantagens como tempo computacional relativamente baixo quando comparado a outros modelos e também pela boa precisão numérica obtida nos resultados. Neste tipo de modelagem as escalas características de comprimento e velocidade são resolvidas separadamente por diferentes equações de transporte. A escala de velocidade turbulenta é calculada através da energia cinética turbulenta e a escala de comprimento

turbulenta é estimada por duas propriedades da turbulência sendo elas a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação.

Vários são os modelos que representam esta classe como por exemplo o k- ε , k- ω . A seguir serão discutidos os modelos k- ε padrão e o RNG k- ε que foram utilizados nas simulações do presente trabalho.

a) Modelo k- ε

Neste modelo a energia cinética turbulenta, k, é definida como uma variação nas flutuações de velocidade e ε é a dissipação turbulenta, que é a taxa na qual as flutuações de velocidade se dissipam. Os valores de k e ε vem diretamente de equações de transporte diferenciais dadas pelas Equações (3.16) e (3.17).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + \rho\varepsilon \quad (3.17)$$

Onde $C_{1\mu}$ e $C_{2\varepsilon}$ são constantes, σ_k e σ_ε correspondem ao número de Prandtl turbulento para k e ε , respectivamente. Assim a viscosidade turbulenta é dada pela Equação (3.18):

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.18)$$

b) Modelo RNG k- ε

Neste modelo as equações k- ε são derivadas pela aplicação de uma técnica estatística minuciosa às equações instantâneas de Navier-Stokes. As novas equações incluem um termo na equação de ε para a interação entre a dissipação turbulenta e o cisalhamento médio, uma fórmula analítica para o número de Prandtl turbulento, uma fórmula diferencial para a viscosidade efetiva e permite uma análise mais profunda dos efeitos da vorticidade na turbulência.

As equações de transporte assumem a seguinte forma para o modelo RNG k- ε (Equações (3.19) e (3.20)).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + \rho\varepsilon \quad (3.20)$$

Onde α_ε e α_k são o inverso do número de Prandtl para o parâmetro ε e k , respectivamente.

3.3.4 – Modelos das Tensões de Reynolds (RSM – Reynolds Stress Model)

Os modelos a duas equações são ferramentas muito eficazes na predição das características e dos fenômenos físicos presentes na maioria dos escoamentos industriais de relevância. Porém quando se trabalha com escoamentos multifásicos como é o caso do problema em questão no presente trabalho, são necessários modelos mais sofisticados e com performance superior aos modelos citados nos itens anteriores. Neste contexto destaca-se o modelo de turbulência RSM. Este modelo é fundamentado em equações de transporte para as componentes individuais do tensor das tensões de Reynolds e para a taxa de dissipação turbulenta. Este modelo não utiliza a hipótese da viscosidade turbulenta.

A equação da quantidade de movimento para a velocidade média é apresentada na Equação (3.21).

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i U_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] = - \frac{\partial p''}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_j}) + S_{M_i} \quad (3.21)$$

Onde "p" é a pressão modificada (Ver Eq. 3.22), S_{M_i} é a soma das forças de contato agindo no fluido e $\overline{\rho u_i u_j}$ é a flutuação das tensões de Reynolds.

$$p'' = p + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \quad (3.22)$$

O termo $\overline{\rho u_i u_j}$ precisa ser determinado para solução da Equação (3.21). Para resolver este problema o modelo RSM faz o uso de uma equação diferencial dada pela Equação (3.23).

$$\frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (U_k \overline{\rho u_i u_j}) - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\left(\delta_{kl} \mu + \rho C_s \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_k u_l} \right) \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_l} \right) = P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \varepsilon + \Phi_{ij} + P_{ij,b} \quad (3.23)$$

Onde P_{ij} e $P_{ij,b}$ são os termos de produção turbulenta de cisalhamento e de buoyancy das tensões de Reynolds respectivamente, Φ_{ij} é o tensor relacionado à pressão e C é uma constante.

Este modelo possui três variáveis sendo elas o RSM LRR-IP, o QI Reynolds Stress Model (LRR-IQ) e o SSG Reynolds Stress Model. Dentre eles o modelo SSG é o mais preciso e no presente trabalho foi escolhido por sua precisão na representação de escoamentos

altamente rotacionais e de sprays turbulentos (ANSYS INC., 2011). A desvantagem deste modelo em relação ao k-ε e suas variáveis reside no tempo computacional que aumenta consideravelmente, porém é suprida pela precisão dos resultados obtidos.

3.4 – Modelagem da Combustão

O regime de combustão sem chama é um processo que envolve forte turbulência devido à injeção de reagentes a altas velocidades, aliada a uma taxa de reação lenta e distribuída ao longo da atmosfera de combustão. Estas características fazem com que este regime seja controlado tanto pela turbulência quanto pelas reações químicas (Dias, 2014).

O parâmetro adimensional que relaciona a turbulência e a cinética química é o número de Damköhler (Da) que é definido como a razão entre a escala de tempo da turbulência (τ_t) e a escala de tempo da reação química (τ_c), apresentado na Equação (3.24).

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (3.24)$$

Para $Da \gg 1$ a combustão é classificada como rápida, ou seja, as taxas de reação se desenvolvem mais rapidamente sendo governadas pela turbulência. Para $Da \ll 1$ as taxas de reação são mais lentas e seu progresso é limitado pela cinética química (ANSYS INC., 2011). A modelagem da combustão está diretamente relacionada ao número de Damköhler e na ferramenta numérica ANSYS CFD os modelos são classificados conforme apresentado na Figura 3.1.

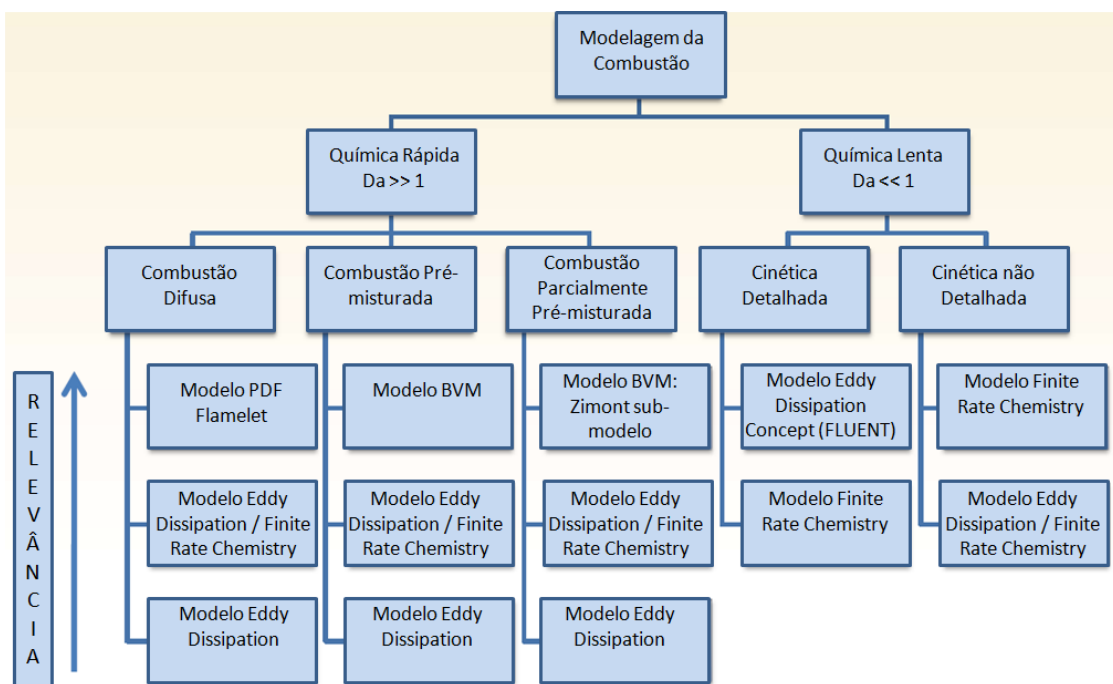


Figura 3.1 – Modelos de combustão disponíveis no ANSYS (ANSYS INC., 2011).

3.4.1 – Eddy Dissipation Concept (EDC)

O EDC assume que em escoamentos turbulentos as reações químicas ocorrem somente se os reagentes se misturarem a nível molecular com as menores escalas, isto é, a energia cinética turbulenta contida nas grandes estruturas do escoamento é transferida para as estruturas finas onde esta energia é dissipada na forma de calor. Estas estruturas finas são pequenos vórtices na escala de Kolmogorov e são responsáveis pela mistura a nível molecular que podem ser modelados como um reator bem misturado. As estruturas finas dissipativas se encontram distribuídas de forma intermitente pelo escoamento, isto faz com que apenas parte destas possam ser queimadas (Chen et al., 2011).

Uma das equações utilizadas no EDC para a taxa de reação, com k e ε sendo calculados pela modelagem de turbulência RANS é apresentada na Equação (3.25).

$$\dot{Y}_F = 23,6 \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon}{k} \right) X \bar{Y}_{\min} \quad (3.25)$$

Onde \dot{Y}_F é a taxa de consumo de combustível, ν é a viscosidade cinemática, X é o fator de correção para a consideração do EDC que somente as frações suficientemente aquecidas nas estruturas finas devem reagir e \bar{Y}_{\min} é o fator que limita a taxa de reação.

Neste tipo de modelagem pode ser inserida uma cinética química de Arrhenius detalhada, porém isto pode tornar o processamento computacional mais demorado. Para evitar este problema aconselha-se utilizar mecanismos de reação de um ou dois passos que são o suficiente para reproduzir resultados mais realísticos e também diminuir o tempo computacional para realização das simulações.

3.4.2 – Modelo Finite Rate Chemistry (FRC)

Na modelagem da combustão pelo modelo FRC os efeitos das flutuações turbulentas são desprezadas e as taxas de reação são determinadas por expressões cinéticas de Arrhenius. Neste tipo de modelagem assume-se que a taxa de progresso R_k da reação primária k pode ser reversível, se e somente se, a reação contrária é definida (ANSYS INC., 2011).

A taxa de reação R_k é calculada pela Equação (3.26):

$$R_k = \left(F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r'_I k_I} - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r''_I k_I} \right) \quad (3.26)$$

Onde $[I]$ é a concentração molar do componente I , F_k e B_k são as constantes de velocidade da reação direta e inversa respectivamente, e r é a ordem de reação da componente I na reação

elementar k que possui o mesmo valor dos coeficientes estequiométricos das reações elementares, porém isto não é uma regra devido ao fato de que algumas reações globais possuem outras formas para o cálculo de r , o que não vem ao caso no presente trabalho.

As constantes de velocidade F_k e B_k são obtidas através das Equações (3.27) e (3.28), onde se nota que estas possuem dependência da temperatura de Arrhenius.

$$F_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (3.27)$$

$$B_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (3.28)$$

Onde A_k representa o fator pré-exponencial, β_k é o expoente da temperatura, E_k é a energia de ativação e T é a temperatura absoluta.

3.4.3 – Modelo Combinado Finite Rate Chemistry/Eddy Dissipation Concept

Este tipo de modelagem combina os modelos citados nas seções anteriores, o FRC e o EDC. A metodologia aplicada consiste no cálculo da taxa de reação por ambos os modelos separadamente, com as respectivas formulações, e o valor mínimo obtido entre os dois é utilizado. Este cálculo ocorre a cada passo da reação separadamente, pois deve-se levar em conta se a reação é limitada pela cinética química ou pela mistura turbulenta para o mesmo instante de tempo e localização física. De forma geral o que a ferramenta numérica faz é decidir qual o melhor modelo entre os dois é mais apropriado a cada passo da reação permitindo a obtenção de resultados mais precisos do que aqueles gerados por estes modelos de forma isolada.

O modelo combinado FRC/EDC pode ser utilizado em uma grande variedade de escoamentos turbulentos reativos e para uma ampla faixa de números de Damköhler representando reações de química lenta a rápida. Porém, ele gera melhores resultados para problemas envolvendo taxas de reação limitadas pela mistura turbulenta em uma determinada área do escoamento e pela cinética química nas demais.

3.5 – Modelagem de Sprays Turbulentos

Um spray é considerado um escoamento multifásico onde há no domínio uma fase líquida dispersa na forma de gotas e uma fase gasosa contínua (Sirigano, 2010). A formação e o desenvolvimento de um spray envolvem fenômenos de transportes e fluido dinâmicos bastante complicados como, por exemplo, a transferência de calor, massa e quantidade de

movimento entre gotas que se formam no spray e taxa de vaporização de gotas. Quando se trata da combustão de sprays o problema se torna um pouco mais complexo, pois além dos fenômenos citados anteriormente também devem ser considerados a presença de distribuição espacial de temperatura, gradientes de concentração, circulação interna de líquido e ainda a interação entre gotas.

Nos sprays de combustíveis líquidos a combustão é diretamente afetada pela interação entre a fase líquida e a gasosa. A fase líquida é que fornece o combustível necessário para o desenvolvimento da combustão e ainda é responsável por adicionar quantidade de movimento ao escoamento no interior da câmara de forma a acelerar a fase gasosa. Os fenômenos mais relevantes que ocorrem na combustão de sprays turbulentos são a atomização, a dispersão turbulenta, a evaporação, a micro mistura e a combustão (Jamali, 2014).

A modelagem da combustão de sprays em ambiente CFD pode ser realizada pelo *Eulerian-Eulerian multiphase model* ou através do *Lagrangian Particle Tracking multiphase model* também conhecido como *Discrete Phase Model (DPM)*. Este último modelo é mais utilizado, pois fornece informações mais completas sobre o comportamento das partículas, a modelagem de turbulência pode ser incluída automaticamente e o tempo computacional envolvido é bem mais baixo frente ao modelo *Eulerian-Eulerian multiphase*. O DPM permite a simulação de uma grande variedade de problemas envolvendo fases discretas como spray drying, dispersão de aerossol, combustão de carvão e de combustíveis líquidos como é o caso do presente trabalho.

3.5.1 – Modelo de Fases Discretas (DPM)

A modelagem de sprays pelo DPM segue uma aproximação Euleriana-Lagrangeana onde a fase fluida ou gasosa do escoamento é tratada como um meio contínuo e a solução desta se dá pelas equações de Navier-Stokes e a fase dispersa (bolhas de gás, gotas ou partículas sólidas) é representada por um grande número de partículas que tem suas trajetórias calculadas de acordo com o referencial Lagrangiano onde as trajetórias das partículas são calculadas individualmente para intervalos de tempo específicos. Como citado anteriormente este modelo se adequa bem à simulação da combustão de partículas líquidas e sólidas, porém não é indicado para modelagem de misturas líquido-líquido, leitos fluidizados ou qualquer tipo de escoamento multifásico onde a fração volumétrica de uma das fases não possa ser desprezada.

A trajetória das partículas no escoamento é determinada através da integração do balanço de forças agindo na partícula calculada com base no ponto de vista Lagrangiano. Em sua forma geral o balanço de forças pode ser escrito conforme descrito na Equação (3.29).

$$\frac{du_p}{dt} = F_D \left(\vec{u} - \vec{u}_p \right) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (3.29)$$

Onde $F_D \left(\vec{u} - \vec{u}_p \right)$ é a força de arrasto por unidade de massa da partícula, \vec{F} é um termo adicional de aceleração (força/unidade de massa), \vec{u} é a velocidade da fase contínua, \vec{u}_p é a velocidade da partícula, ρ_p é a massa específica da partícula e ρ é a massa específica do fluido.

A força de arrasto presente na Equação (3.28) é calculada pela Equação (3.30).

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D \text{Re}}{24} \quad (3.30)$$

Sendo μ a viscosidade molecular do fluido, d_p o diâmetro da partícula e Re o número de Reynolds que é definido como:

$$\text{Re} \equiv \frac{\rho d_p \left| \vec{u}_p - \vec{u} \right|}{\mu} \quad (3.31)$$

O coeficiente de arrasto C_D presente na Equação (3.30) não foi definido até o presente momento. Este termo é de crucial importância para garantir maior precisão na modelagem de sprays, portanto sua modelagem requer muito cuidado. O coeficiente de arrasto das gotas (partículas) pode ser calculado por diferentes modelos de acordo com a forma, tamanho e velocidade da gota. A forma mais simples de realizar este cálculo é pela Equação (3.32) onde os coeficientes a_1 , a_2 e a_3 são parâmetros relacionados ao número de Reynolds (Jamali, 2014).

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{\text{Re}} + \frac{a_3}{\text{Re}^2} \quad (3.32)$$

Porém muitos modelos de arrasto de gota assumem a hipótese que a gota permanece esférica no domínio e assim o coeficiente de arrasto é dado pela Equação (3.33) proposta por Liu et al., (1993).

$$C_{D,esfera} = \begin{cases} 0,424 \rightarrow \text{Re} < 1000 \\ \frac{24}{\text{Re}} \left(1 + \frac{1}{6} \text{Re}^{2/3} \right) \rightarrow \text{Re} \geq 1000 \end{cases} \quad (3.33)$$

3.5.2 – Atomização

Embora a atomização seja um dos fenômenos de maior importância na caracterização de sprays ela ainda não é bem entendida devido à dificuldade de acesso à região mais densa do spray tanto de forma experimental quanto numérica, tanto é que a grande maioria das modelagens de sprays são realizadas com o spray já atomizado levando em conta condições experimentais como a distribuição inicial de gotas (Gutheil, 2011).

Na Figura 3.3 estão representados os regimes de escoamento e os processos de atomização que se desenvolvem durante a formação do spray. São observados três regimes de escoamento que são classificados de acordo com a fração volumétrica ocupada pela fase dispersa. Para regiões onde a fração volumétrica da fase dispersa encontra-se acima de 10^{-3} o regime de escoamento é classificado como regime denso que é dominado pelo fenômeno da atomização e é comum ocorrer colisão entre gotas e coalescência. O regime intermediário é classificado como regime diluído que resulta da forte interação da turbulência presente nas fases dispersa e contínua gerando regiões de frações volumétricas variando entre 10^{-6} e 10^{-3} . O último regime que se desenvolve é o muito diluído onde a concentração da fase dispersa é muito baixa com frações volumétricas muito menores que 10^{-6} , nesta fase as interações turbulentas entre fases são insignificantes e os fenômenos de colisão e coalescência são completamente descartados.

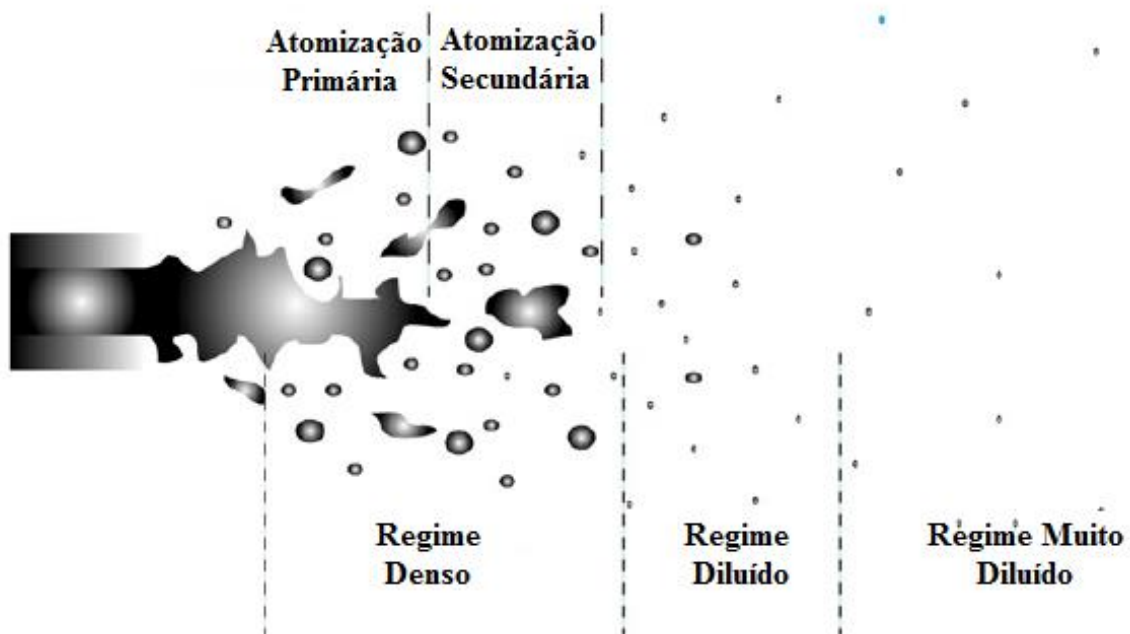


Figura 3.2 – Representação dos regimes de escoamento e da atomização em sprays. Adaptada de Jenny et al., 2012.

O fenômeno da atomização é descrito em duas fases a primária e a secundária e ambas ocorrem no regime de escamento denso. A atomização tem sua origem quando a jato de líquido é injetado na corrente de gás, a interação entre as duas fases resulta em instabilidades de Kelvin-Helmholtz que posteriormente originam instabilidades de Rayleigh-Taylor, este processo faz com que o jato de líquido inicie sua desintegração formando grandes gotas e ligamentos líquidos, sendo esta primeira fase denominada Atomização ou Quebra Primária. Este processo ainda leva ao surgimento de forças aerodinâmicas devido à interação da velocidade relativa entre as fases dispersa e contínua resultando em novas instabilidades levando à desintegração das gotas e ligamentos em pequenos fragmentos, processo este denominado Atomização ou Quebra Secundária.

Os mecanismos de quebra são caracterizados de acordo com o número de Weber. O número de Weber (ver Eq. (3.34)) relaciona as forças de inércia com a tensão superficial, muito utilizado para caracterização de escoamentos multifásicos com fortes interações entre fases.

$$We = \frac{\rho d |u - u_d|^2}{\sigma} \quad (3.34)$$

Onde d é o diâmetro da gota, ρ é a massa específica do fluido na fase contínua, u é a velocidade da fase contínua, u_d é a velocidade da gota e σ é a força de tensão superficial.

De forma geral quanto maior o número de Weber, maior a deformação sofrida pelas gotas e ligamentos líquidos e conseqüentemente sua fragmentação. Os regimes de quebra secundária são classificados como *vibrational breakup* para $We < 12$, *bag breakup* para $12 < We < 50$, *bag-and-stamen breakup* para $50 < We < 100$, *sheet stripping* para $100 < We < 350$ e *catastrophic breakup* para $350 < We$.

Para simulação da quebra primária de partículas o ANSYS CFX disponibiliza quatro modelos: Blob Method, Enhanced Blob Method, LISA Model e Turbulence Induced Atomization. No presente trabalho foi escolhido o modelo Blob Method com injeção do tipo cone com quebra primária devido às características do spray em estudo.

O modelo Blob Method assume que uma descrição detalhada dos processos de quebra e atomização no interior da região de quebra primária do spray não é necessária. As gotas são consideradas esféricas com diâmetro uniforme e ao serem injetadas estão sujeitas à quebra secundária. Esta modelagem permite o calcular a velocidade de injeção de cada gota bem como a distribuição de diâmetros das gotas no interior da câmara de combustão e o único parâmetro necessário no início da simulação é o ângulo do cone do spray que pode ser fornecido por dados experimentais ou calculado por relações empíricas.

Dentre os modelos de quebra secundária disponíveis encontram-se o *Reitz and Diwakar Breakup Model*, *Schmehl Breakup Model*, *Taylor Analogy Breakup Model* (TAB) e o *Enhanced TAB Model* (ETAB). Estes modelos calculam a quebra das gotas e analisam a influência dos fenômenos de colisão e coalescência no tamanho de gota formado a jusante do spray.

3.5.3 – Evaporação

O processo de evaporação de gotas em sprays é de extrema importância quando se trabalha com combustão. Considera-se que o vapor de combustível é injetado na atmosfera de combustão pela evaporação de gotas na fase gasosa para reagir em taxas determinadas conforme ocorre em chamas puramente gasosas. Sendo assim as gotas no interior do spray são consideradas como fonte distribuída de vapor de combustível (Sacomano Filho, 2011).

A evaporação de gotas envolve vários fenômenos que merecem atenção como a transferência de calor e massa, dinâmica dos fluidos e cinética química. A modelagem deste processo requer cuidado, pois a taxa de evaporação influencia significativamente a performance do combustor. Se durante as simulações numéricas a taxa de evaporação excessiva pode levar a erros nos perfis de temperatura, conforme observado por Rochaya (2007) e também alterar os perfis de velocidade (Sacomano Filho, 2011).

A evaporação ocorre quando a temperatura da gota está se encontra acima da temperatura de evaporação e abaixo da temperatura de ebulição do combustível em questão à pressão atmosférica. No ANSYS CFX a evaporação das gotas é modelada através do Modelo de Evaporação de Líquido que é destinado à modelagem de partículas com transferência de massa e calor.

São utilizadas duas correlações para transferência de massa que levam em conta a condição da gota, isto é, se sua temperatura se encontra acima ou abaixo do ponto de ebulição. Se a partícula se encontra acima do ponto de ebulição a transferência de massa é determinada pela Equação (3.35).

$$\frac{dm_p}{dt} = -\frac{Q_C + Q_R}{V} \quad (3.35)$$

Onde V é o calor latente de evaporação da gota e Q_C e Q_R são coeficientes de transferência de calor convectivo e radiativo, respectivamente.

Quando a partícula está abaixo do ponto de ebulição a transferência de massa é dada pela Equação (3.36).

$$\frac{dm_p}{dt} = \pi d_p \rho D Sh \frac{W_C}{W_G} \ln \left(\frac{1 - X_S^V}{1 - X_{vap}^V} \right) \quad (3.36)$$

Onde d_p é o diâmetro da partícula, ρD é a difusividade dinâmica do meio contínuo, Sh é o número de Sherwood, W_C e W_G são os pesos moleculares do vapor e da mistura na fase contínua, X_S^V é a fração molar do vapor no equilíbrio da component de evaporação na superfície de uma gota e X_{vap}^V é fração molar da componente de evaporação na fase gasosa.

3.5.4 – Dispersão Turbulenta

A dispersão turbulenta resulta da ação combinada entre as camadas turbulentas e o arrasto presente entre as fases contínua e dispersa. O que ocorre é que as gotas são arrastadas pelas estruturas turbulentas presentes na fase contínua e são transportadas pelo efeito do arrasto entre fases fazendo com que as partículas sejam levadas de regiões de alta para regiões de baixa concentração.

A dispersão turbulenta pode ser incluída nas simulações numéricas através de modelos de transporte estocásticos ou modelos de nuvens de partículas. No caso do presente trabalho o primeiro tipo de modelagem é mais comum onde se destaca o Modelo de Avanço Randômico (DRW – do inglês: *Discrete Random Walk*) que inclui os efeitos das flutuações de velocidade turbulentas instantâneas na trajetória das partículas.

No DRW a interação entre uma partícula com as estruturas turbulentas da fase contínua é simulada. Cada estrutura é caracterizada por uma distribuição randômica Gaussiana de flutuação de velocidade (u' , v' e w') e por uma escala de tempo (τ_e). Os valores de u' , v' e w' que prevalecem durante o tempo de vida de uma estrutura turbulenta passam por uma amostragem estatística e considera-se que eles obedecem a uma Distribuição de Probabilidade Gaussiana, conforme apresentado na Equação (3.37).

$$u' = \zeta \sqrt{u'^2} \quad (3.37)$$

Onde ζ é um número randômico normalmente distribuído e $\sqrt{u'^2}$ é o valor local RMS das flutuações de velocidade. Quando se trabalha com o modelo de turbulência RSM os valores da flutuação de velocidade podem variar, já para os modelos k- ϵ , k- ω e suas variantes as componentes flutuantes da velocidade RMS podem ser definidos, assumindo isotropia, pela Equação (3.38).

$$\sqrt{u'^2} = \sqrt{v'^2} = \sqrt{w'^2} = \sqrt{2k/3} \quad (3.38)$$

De forma geral as flutuações de velocidade são calculadas com base nos valores locais RMS das componentes da velocidade (ver Equações (3.39) a (3.41)), onde é considerada a anisotropia das tensões na derivação das flutuações de velocidade.

$$u' = \zeta \sqrt{u'^2} \quad (3.39)$$

$$v' = \zeta \sqrt{v'^2} \quad (3.40)$$

$$w' = \zeta \sqrt{w'^2} \quad (3.41)$$

A escala de tempo característica das estruturas turbulentas definida como uma constante e é dada pela Equação (3.42).

$$\tau_e = 2T_L \quad (3.42)$$

Onde T_L é uma escala de tempo integral Lagrangiana que tem seu cálculo aproximado pela Equação (3.43) onde a constante C_L ainda não é bem conhecida, porém para soluções envolvendo o modelo k- ϵ assume o valor de 0,15 e para o modelo RSM tem valor 0,30 (ANSYS INC., 2011).

$$T_L = C_L \frac{k}{\epsilon} \quad (3.43)$$

O modelo DRW requer que durante as simulações seja utilizado um número considerável de partículas para considerar o comportamento estocástico da turbulência, porém deve-se tomar cuidado, pois para cada partícula há um determinado número de tentativas para o cálculo da trajetória que não deve exceder a 5 fornecendo uma boa representação estatística da dispersão das partículas devido à turbulência. Assim quanto maior o número de partículas maior o tempo computacional envolvido nesta fase da simulação (Rochaya, 2007)

3.5.5 – Acoplamento entre Fases

Em escoamentos multifásicos a troca de quantidade de movimento entre as fases contínua e dispersa ocorre de forma incessante fazendo com que o escoamento contínuo afete a trajetória das gotas da mesma forma que as gotas afetem o escoamento contínuo. Esta interação entre fases é considerada nas simulações numéricas através do acoplamento entre fases. De forma resumida, este processo permite que os valores das quantidades da fase gasosa sejam calculados na posição de cada partícula fornecendo as quantidades necessárias para a solução das equações de cada uma delas, o que é feito a cada iteração das equações da fase dispersa (Sacomano Filho, 2011).

No ANSYS CFX o acoplamento entre a fase contínua e a dispersa pode ser feita de duas maneiras pelo *Fully Coupled* ou pelo *One-Way Coupling*. A diferença entre os dois é que o *Fully Coupled* permite o cálculo do efeito da fase contínua na fase dispersa e da fase dispersa na fase contínua, ou seja, ambos os efeitos são levados em conta nas equações. Já o *One-Way Coupling* simplesmente prediz as trajetórias das partículas como um pós-processamento com base no campo de escoamento, não levando em conta a influência da fase contínua no campo de escoamento.

Para a escolha do tipo de acoplamento deve-se ter em mente a razão entre a vazão mássica de partículas e a vazão mássica do fase contínua. O *One-Way Coupling* é aconselhável para aproximações em escoamentos com baixas vazões mássicas onde a influência da fase dispersa na fase contínua possa ser desprezada, caso contrário deve-se usar o *Fully Coupled*, conforme realizado no presente trabalho.

3.6 – Mecanismo de Reação para o Etanol

Para garantir resultados precisos em simulações numéricas envolvendo o regime de combustão sem chama é necessário fazer o uso de mecanismos de reação que representem a reação completa do combustível considerando os elementos que se formam à medida que a reação ocorre (Yang & Blasiak, 2005).

Na literatura são encontrados modelos de cinética química detalhada para a reação de oxidação do etanol com ar, dentre eles destaca-se o mecanismo descrito por Marinov (1999) que consiste em 372 reações elementares e 57 espécies. Porém, trabalhar com um número tão alto de reações resulta em um grande tempo computacional e exige máquinas de alto desempenho para realização deste tipo de simulação. Sendo assim o presente trabalho utiliza o mecanismo de reação com 70 reações elementares e 26 principais espécies químicas para a reação etanol/ar proposto por Verma (2004) e foi escolhido por permitir analisar as emissões de gases CO e NO no processo de forma direta, pois as reações presentes no ANSYS CFX para os respectivos gases geram valores para a concentração destes na exaustão do combustor não condizentes com os valores experimentais disponíveis para comparação. As reações são apresentadas na Tabela 3.1.

A taxa de reação para o etanol, segundo Verma (2004), é dada pela Equação (3.44):

$$K = AT^n e^{-E/RT} \quad (3.44)$$

Onde K é a taxa de reação dada em (cm³/mols), A é o fator pré-exponencial de Arrhenius, T é a temperatura dada em (K), E é a energia de ativação (J/mol), R é a constante universal dos gases perfeitos (cm³.MPa/K.mol) e n é o exponencial da temperatura.

Tabela 3.1 – Mecanismo de reação para o etanol.

	Reação	A	n	E
1	$\text{CH}_3\text{OH}=\text{CH}_3+\text{OH}$	3,020E+18	0,00	80.000
2	$\text{CH}_3\text{OH}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{OH}+\text{HO}_2$	3,981E+10	0,00	50.910
3	$\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}=\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}$	5,248E+12	0,00	5.340
4	$\text{CH}_2\text{OH}=\text{CH}_2\text{O}+\text{H}$	2,511E+13	0,00	29.000
5	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$	1,000E+12	0,00	6.000
6	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}=\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2$	3,012E+12	0,00	0
7	$\text{CH}_4=\text{CH}_3+\text{H}$	1,995E+17	0,00	88.000
8	$\text{CH}_4+\text{O}_2=\text{CH}_3+\text{HO}_2$	7,943E+13	0,00	56.000
9	$\text{CH}_4+\text{H}=\text{CH}_3+\text{H}_2$	2,239E+04	3,00	8.750
10	$\text{CH}_4+\text{OH}=\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}$	3,467E+03	3,08	2.000
11	$\text{CH}_4+\text{O}=\text{CH}_3+\text{OH}$	1.17E+07	2,08	7.630
12	$\text{CH}_4+\text{HO}_2=\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}_2$	1,995E+13	0,00	18.000
13	$\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}=\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$	7,586E+12	0,00	170
14	$\text{CH}_2\text{O}+\text{H}=\text{HCO}+\text{H}_2$	3,311E+14	0,00	10.500
15	$\text{CH}_2\text{O}+\text{O}=\text{HCO}+\text{OH}$	5,012E+13	0,00	4.600
16	$\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2=\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}_2$	1,000E+12	0,00	8.000
17	$\text{HCO}=\text{H}+\text{CO}$	1,445E+14	0,00	19.000
18	$\text{HCO}+\text{O}_2=\text{CO}+\text{HO}_2$	3,311E+12	0,00	7.000
19	$\text{HCO}+\text{OH}=\text{CO}+\text{H}_2\text{O}$	1,000E+14	0,00	0
20	$\text{HCO}+\text{H}=\text{CO}+\text{H}_2$	1,995E+14	0,00	0
21	$\text{HCO}+\text{O}=\text{CO}+\text{OH}$	1,000E+14	0,00	0
22	$\text{CO}+\text{O}=\text{CO}_2$	5,888E+15	0,00	4.100
23	$\text{CO}+\text{O}_2=\text{CO}_2+\text{O}$	2,512E+12	0,00	47.690
24	$\text{CO}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}$	1,513E+08	1,30	-770
25	$\text{CO}+\text{HO}_2=\text{CO}_2+\text{OH}$	5,754E+13	0,00	2.293
26	$\text{H}_2+\text{O}_2=\text{OH}+\text{OH}$	1,700E+13	0,00	47.780
27	$\text{OH}+\text{H}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{H}$	1,170E+09	1,30	3.626
28	$\text{O}+\text{OH}=\text{O}_2+\text{H}$	4,000E+14	-0,50	0
29	$\text{O}+\text{H}_2=\text{OH}+\text{H}$	5,060E+04	2,67	6.290
30	$\text{H}+\text{O}_2=\text{HO}_2$	3,610E+17	-0,72	0
31	$\text{OH}+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$	7,500E+12	0,00	0
32	$\text{H}+\text{HO}_2=\text{OH}+\text{OH}$	1,400E+13	0,00	1.073
33	$\text{OH}+\text{OH}=\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	6,000E+08	1,30	0
34	$\text{H}+\text{H}=\text{H}_2$	1,000E+18	-1,00	0
35	$\text{H}+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}$	1,600E+22	-2,00	0
36	$\text{O}+\text{O}=\text{O}_2$	1,890E+13	0,00	-1.788
37	$\text{H}+\text{HO}_2=\text{H}_2+\text{O}_2$	1,250E+13	0,00	0
38	$\text{HO}_2+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2$	2,000E+12	0,00	0

39	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	1,600E+12	0,00	0
40	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1,000E+13	0,00	1.800
41	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} = \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{OH}$	3,020E+18	0,00	75.470
42	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H}_2$	3,981E+10	0,00	50.000
43	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{OH} = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H}_2\text{O}$	3,020E+13	0,00	5.960
44	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H} = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H}_2$	4,365E+12	0,00	4.570
45	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{O} = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{OH}$	6,760E+12	0,00	1.510
46	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H}_2\text{O}_2$	6,309E+12	0,00	15.000
47	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{CH}_3 = \text{CH}_3\text{CHOH} + \text{CH}_4$	3,980E+12	0,00	9.690
48	$\text{CH}_3\text{CHOH} = \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}$	5,012E+13	0,00	21.850
49	$\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{CHO} + \text{HO}_2$	1,000E+13	0,00	5.560
50	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H} = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	5,248E+12	0,00	5.000
51	$\text{CH}_3\text{CHO} = \text{CH}_3 + \text{HCO}$	7,079E+15	0,00	81.760
52	$\text{CH}_3\text{CHO} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}$	5,012E+14	0,00	87.860
53	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{CO} + \text{HO}_2$	1,995E+14	0,50	42.200
54	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{H} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2$	3,981E+13	0,00	4.200
55	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{OH} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1,000E+13	0,00	0
56	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{O} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{OH}$	5,012E+12	0,00	1.790
57	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{CH}_3 = \text{CH}_3\text{CO} + \text{CH}_4$	1,698E+12	0,00	8.430
58	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{HO}_2 = \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2\text{O}_2$	1,698E+12	0,00	10.700
59	$\text{CH}_3\text{CO} = \text{CH}_3 + \text{CO}$	3,020E+13	0,00	17.240
60	$\text{CO}_2 + \text{N} = \text{NO} + \text{CO}$	1,900E+11	0,00	3.400
61	$\text{HO}_2 + \text{NO} = \text{NO}_2 + \text{OH}$	2,110E+12	0,00	-479
62	$\text{NO}_2 + \text{H} = \text{NO} + \text{OH}$	3,500E+14	0,00	1.500
63	$\text{NO}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{O}_2$	1,000E+13	0,00	600
64	$\text{N}_2\text{O} + \text{H} = \text{N}_2 + \text{OH}$	7,600E+13	0,00	15.200
65	$\text{N}_2\text{O} = \text{N}_2 + \text{O}$	1,600E+14	0,00	51.600
66	$\text{N}_2\text{O} + \text{O} = \text{N}_2 + \text{O}_2$	1,000E+14	0,00	28.200
67	$\text{N}_2\text{O} + \text{O} = \text{NO} + \text{NO}$	1,000E+14	0,00	28.200
68	$\text{N} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{O}$	3,270E+12	0,30	0
69	$\text{N} + \text{O}_2 = \text{NO} + \text{O}$	6,400E+09	1,00	6.280
70	$\text{N} + \text{OH} = \text{NO} + \text{H}$	3,8E=13	0,00	0

Capítulo 4

ANÁLISE DE RESULTADOS

Neste capítulo serão apresentados os resultados numéricos iniciais para a combustão sem chama de etanol hidratado obtidos através do software ANSYS CFX.

Conforme disposto em Gutheil (2011) o processo de atomização de combustíveis líquidos ainda não é bem entendida devido à dificuldade de acesso à região mais densa do spray tanto de forma numérica quanto experimental. Sendo assim a maioria das simulações são inicializadas com o spray já atomizado e com uma distribuição de gotas definidas por testes experimentais como, por exemplo, em Rochaya (2007), Bekdemir (2008) e Jamali (2014). Por este motivo trabalhar-se-á nas simulações da presente tese com a geometria a partir da região de injeção de spray de etanol hidratado o que implica em uma malha numérica com menos elementos, reduzindo a complexidade na aplicação das condições de contorno do problema e diminuindo consideravelmente o tempo computacional gasto nas simulações.

A geometria gerada no software SolidWorks 2010 é apresentada na Figura 4.1, na qual são observados 8 dutos para injeção de ar de combustão e a região de injeção do spray de combustível definida no ponto central na pré-câmara disposta na parte inferior da Figura 4.1. Na parte superior o cilindro de diâmetro menor corresponde à região de exaustão dos gases da combustão.

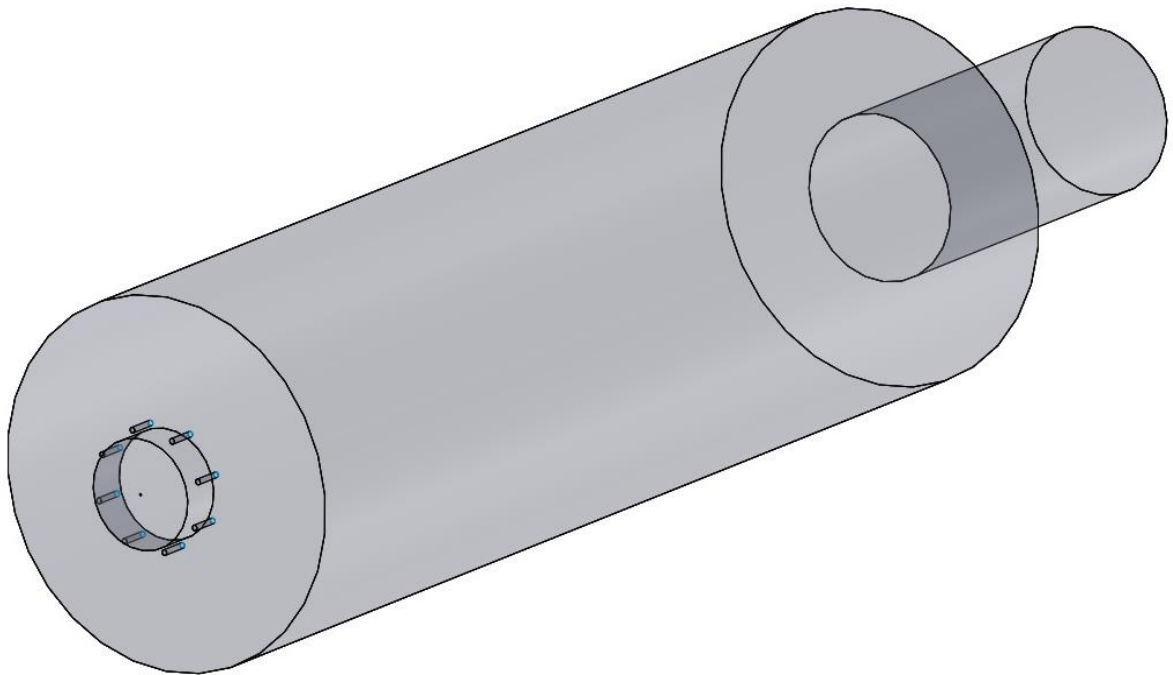


Fig. 4.1 – Representação da geometria da câmara de combustão.

Para realização das simulações numéricas foi utilizada um malha composta por elementos de tamanho 6 mm, que corresponde ao tamanho máximo do elemento no domínio, resultando em uma malha do tipo TETRA/MIXED com 1.583.049 elementos e 282.552 nós gerada no software ICEM CFX 13.0 (ver Fig. 4.2). Neste estudo não foi considerada a questão da independência de malha devido à condição de injeção do spray de etanol em forma de partículas líquidas, que requer um domínio discretizado através de uma malha com alto grau de refinamento de forma que a distribuição de combustível seja reproduzida de forma correta, aumentando a possibilidade de atingir resultados numéricos mais próximos aos experimentais e promovendo ambiente propício para o desenvolvimento de regime de combustão sem chama. Nas simulações também foi considerada a geometria total da câmara, pois o comportamento do escoamento não é simétrico devido à alta taxa de recirculação gerada pelo spray no interior da câmara e também para a análise da possível formação de pontos quentes na atmosfera de combustão.

A malha escolhida foi satisfatória nas análises, pois os resultados analisados inicialmente proporcionaram uma boa distribuição do combustível no interior da câmara, favorecendo sua queima e também resultando em um menor tempo computacional frente a malhas com refinamento muito elevado.

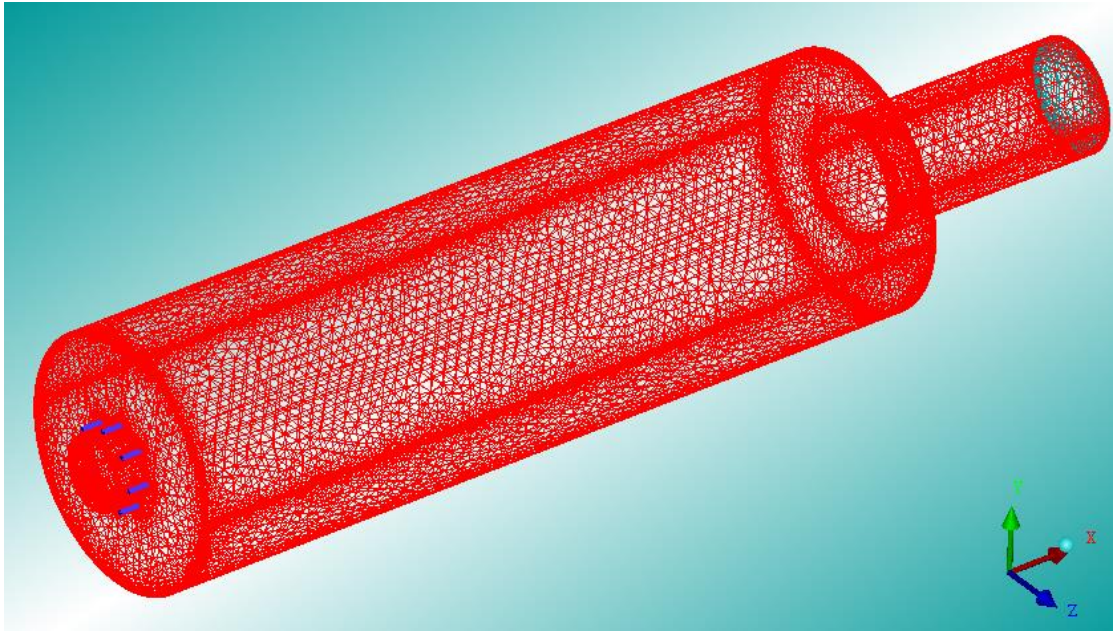


Figura 4.2 – Malha utilizada nas simulações numéricas.

A validação da modelagem numérica desenvolvida neste estudo foi realizada através da comparação entre os resultados numéricos obtidos e os experimentais de Azevedo (2013) disponíveis para a distribuição de temperaturas no interior da câmara de combustão e de emissões de poluentes no processo de combustão. Para obter o perfil axial de temperatura no interior da câmara a autora instalou seis termopares ao longo do corpo da câmara distando 50, 140, 200, 260 e 280 mm da base da câmara e de acordo com a estabilização das condições de operação da câmara de combustão foram tomadas as medidas de temperatura média local na direção radial nos pontos 5, 15, 25, 35 e 45 mm. A malha de medição de temperaturas é representada na Figura 4.3. A medição da emissão de poluentes foi feita na exaustão da câmara de combustão.

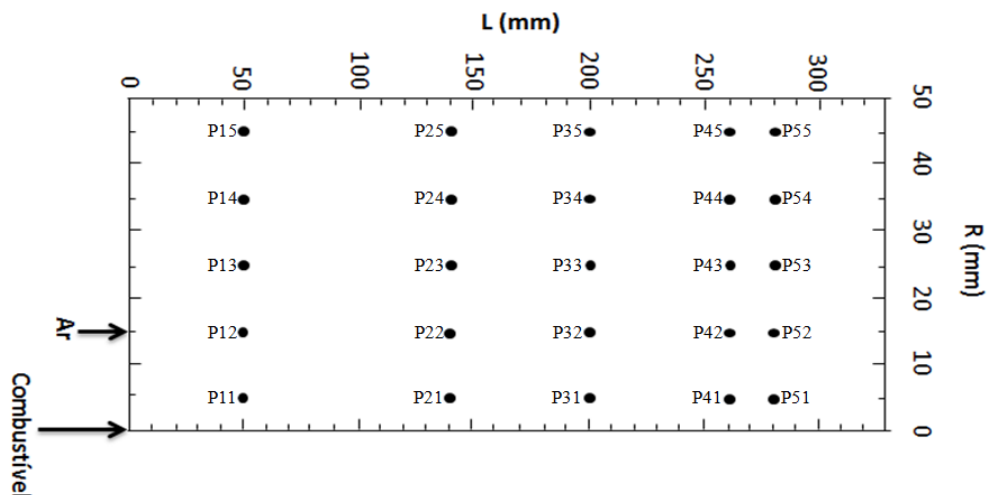


Figura 4.3 – Malha para medição de temperatura experimental de Azevedo (2013).

Nas análises numéricas foram tomados os valores médios locais de temperatura para os mesmos pontos considerados na Figura 4.3 e os resultados serão apresentados nas seções seguintes do presente capítulo.

O tempo computacional gasto para cada simulação numérica em um computador comum, com 16 GB de memória RAM e processador Intel Core i5-650 de 3,20 GHz, é de aproximadamente 120 horas para 4000 iterações. Ao fim destas iterações, tanto os valores residuais eram baixos, na ordem de 10^{-6} , quanto as grandezas na saída do combustor que não tiveram variação significativa dos valores.

4.1 – Estudo do Processo de Combustão

4.1.1 - Condições iniciais para desenvolvimento das simulações numéricas

As condições experimentais de Azevedo (2013) para desenvolvimento das simulações numéricas estão apresentadas na Tabela 4.1. Embora a autora tenha desenvolvido todo um estudo para caracterização do spray, no ANSYS CFX são necessárias para representação do spray pelo modelo Cone com Quebra Primária de Gotas a velocidade de injeção do ar para formação do spray (V_{ar_spray}), o ângulo do cone do spray e a vazão mássica de combustível ($\dot{m}_{combustível}$). Para completar as condições iniciais para o processo de combustão devem ser definidos o coeficiente de excesso de ar (λ) e a velocidade de injeção do ar de combustão (V_{ar_comb}).

Tabela 4.1 – Condições experimentais para realização das simulações numéricas.

TESTE	λ	P (kW)	V_{ar_comb} (m/s)	$\dot{m}_{combustível}$ (g/s)	Angulo do Cone (°)	V_{ar_spray} (m/s)
1	1,65	2	47,35	0,08	21	170,0
2	2,05	2	59,11	0,08	21	213,3
3	2,26	2	65,29	0,08	21	253,3
4	2,45	2	70,88	0,08	21	276,7
5	1,21	4	71,07	0,16	20	170,0
6	1,41	4	83,01	0,16	21	213,3
7	1,61	4	94,95	0,16	21	253,3
8	1,80	4	106,31	0,16	20	276,7

Para as simulação do processo de combustão foram utilizados os modelos de turbulência k- ϵ standard e RNG k- ϵ , os modelos de combustão *Edge Dissipation Concept* (EDC), *Finite Rate Chemistry* (FRC) e FRC/EDC e o modelo de radiação *Discrete Transfer* (DT).

4.1.2 - Validação da modelagem numérica da turbulência e da combustão

Na primeira parte do estudo foram realizadas simulações com os dados do TESTE 1 (Tabela 4.1) a fim de analisar entre os modelos de turbulência k- ϵ standard e RNG k- ϵ e os modelos de combustão EDC, FRC e FRC/EDC aqueles que melhor representam os fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos para o problema em estudo.

Para validação dos resultados numéricos foram levantados os perfis de temperatura no interior da câmara de combustão de acordo com a malha de medição experimental, demonstrada anteriormente na Figura 4.3, utilizada por Azevedo (2013) e os mesmos foram comparados aos valores experimentais disponíveis.

4.1.2.1 – Simulação 1: k- ϵ standard/EDC/DT

As primeiras análises foram feitas utilizando os modelos padrões de turbulência k- ϵ standard e de combustão EDC para uma primeira aproximação com este tipo de modelagem. Quanto à modelagem de radiação foi escolhido o DT, um modelo muito apropriado para previsões gerais de radiação, sendo facilmente incorporado a códigos em CFD e com capacidade de gerar resultados com alto grau de precisão, permitindo controlar a relação entre precisão e eficiência (Baburic et al., 2004; Yao et al., 1994).

Como não é possível comparar as imagens geradas pelo ANSYS CFX com as experimentais, serão apresentadas análises gráficas dos valores numéricos de temperatura obtidos nos pontos de medição indicados na Figura 4.3 onde são representados os perfis axiais de temperatura ao longo da câmara de combustão de acordo com as posições radiais.

Na Figura 4.4 observa-se que os resultados numéricos se mantêm em torno de 1000°C ao longo da direção axial para todas as posições radiais consideradas enquanto os resultados experimentais se mostram em uma faixa entre 750°C e 920°C com uma tendência de aumento de temperatura ao longo da região central da câmara e diminuição da temperatura nas proximidades da região de exaustão.

Os modelos k- ϵ standard/EDC/DT levam a uma região de alta temperatura com valores da ordem de 1660°C (Ponto 1, Fig. 4.5) na região próxima à injeção de combustível e 2000°C na região de injeção do ar de combustão (Ponto 2, Fig. 4.5), enquanto os resultados experimentais mostram que o ar de combustão é injetado na câmara com valores de temperatura próximos a 800°C.

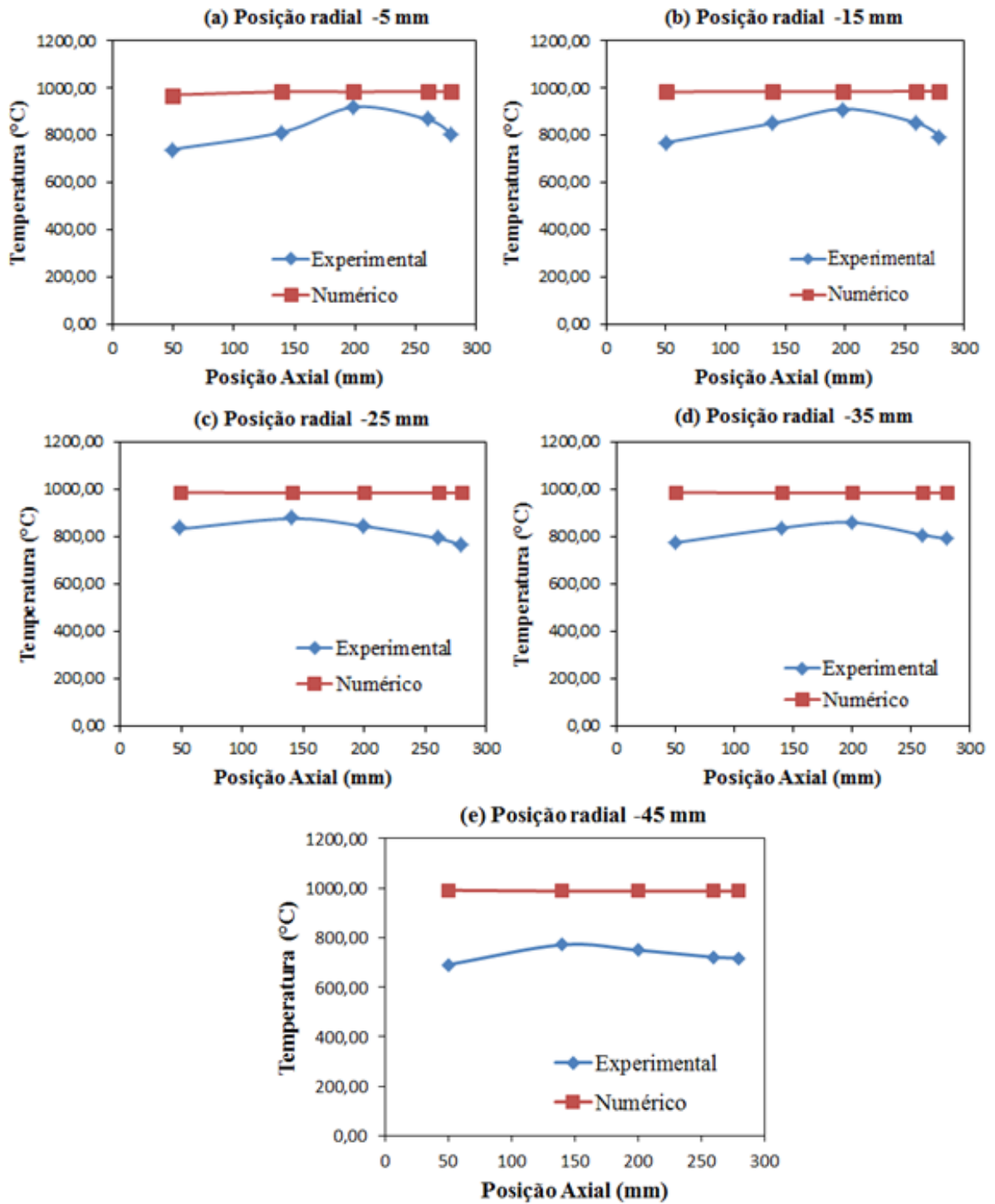


Figura 4.4 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos $k-\epsilon$ /EDC/DT.

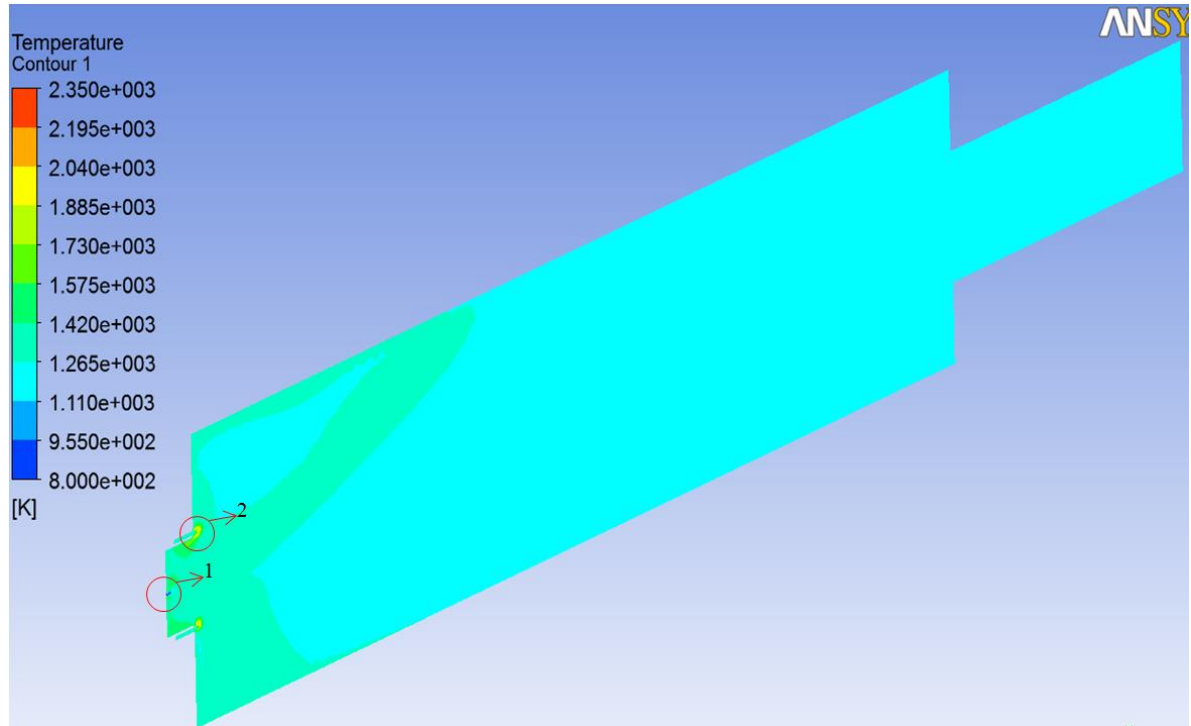


Figura 4.5 – Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para os modelos k- ϵ standard/EDC/DT.

Na Figura 4.6 nota-se que a formação de vórtices próximos à região de exaustão da câmara (pontos 3 e 4, Fig. 4.6) promovem o desenvolvimento de escoamento reverso (pontos 1 e 2, Fig. 4.6) no interior da câmara de combustão que podem influenciar na não reprodução dos resultados experimentais. Dias (2014) mostra em suas discussões que o escoamento reverso pode ser criado pelo programa computacional de forma a auxiliar o processo de convergência e tende a desaparecer após um determinado número de iterações. Caso isto não aconteça e o escoamento apresente escoamentos reversos em diversas faces do domínio deve-se então analisar os modelos escolhidos e as condições de contorno utilizadas nas simulações numéricas para inicialização do problema. As diferenças entre os resultados experimentais e os numéricos encontrados na presente simulação podem ser associadas à formação de escoamento reverso com base nos modelos de turbulência e combustão utilizados. Porém, como não há dados experimentais sobre a distribuição de velocidades no interior da câmara, assume-se esta associação apenas como uma hipótese que pode ser avaliada em estudos futuros após a validação dos modelos com a distribuição de temperatura.

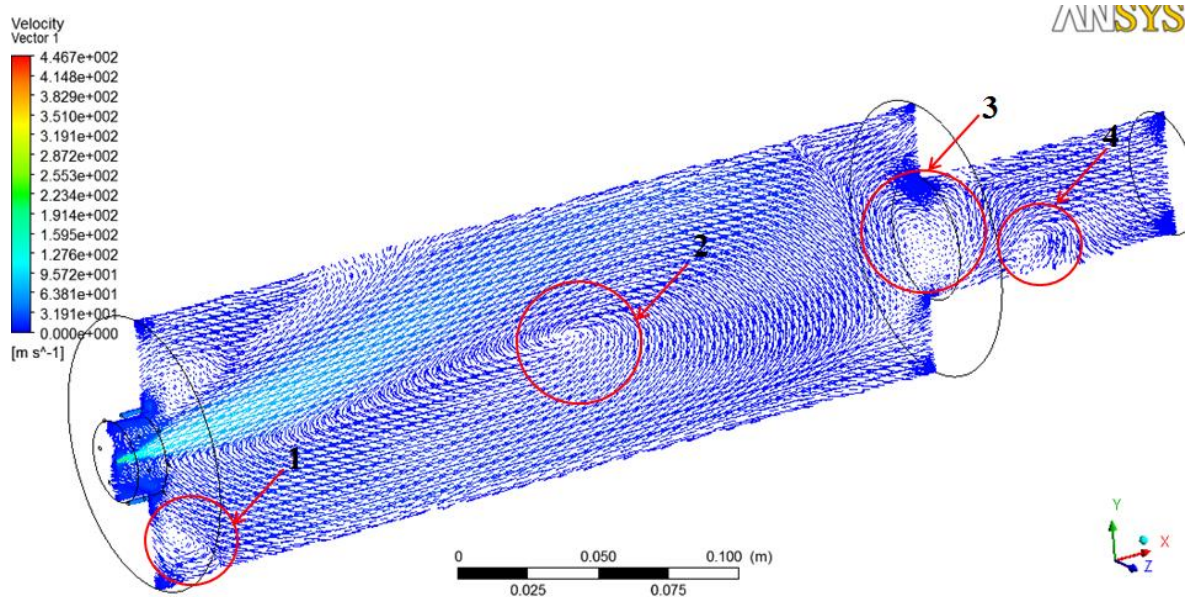


Figura 4.6 – Campo de velocidades gerado no interior da câmara de combustão para os modelos $k-\varepsilon$ /EDC/DT.

4.1.2.2 – Simulação 2: $k-\varepsilon$ standard/FRC/DT

O segundo modelo de combustão testado é o *Finite Rate Chemistry* (FRC). Na análise gráfica representada na Figura 4.7 observa-se uma queda considerável de temperatura no interior da câmara de combustão frente aos valores obtidos pelo modelo EDC.

Os valores numéricos de temperatura para o modelo FRC se aproximam dos experimentais, porém o que se nota é que o perfil de temperatura experimental cai a partir da posição axial 200 mm para as posições radiais -5, -15 e -35 mm e na posição axial de 140 mm para as posições radiais -25 e -45 mm, enquanto o perfil numérico tende a aumentar a partir destas posições axiais.

Outro fato a ressaltar é que a temperatura nas proximidades da região de injeção de ar de combustão atingem valores próximos a 1000°C (Ponto 1, Fig. 4.8), enquanto os valores experimentais são da ordem de 730°C o que mostra que a temperatura de injeção do ar de combustão continua superestimada para a modelagem desenvolvida na presente simulação e requer uma investigação mais minuciosa para maior aproximação com os valores experimentais.

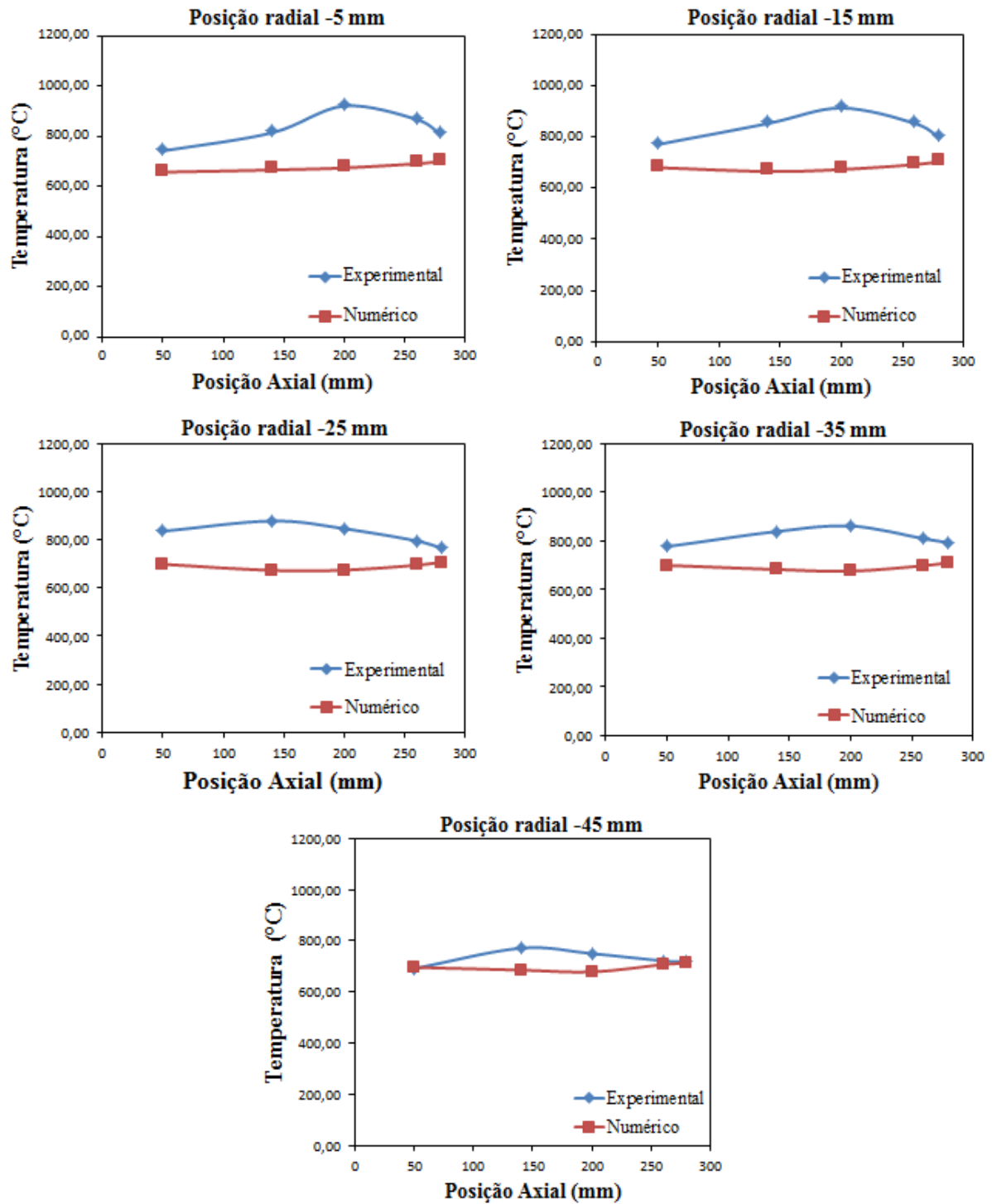


Figura 4.7 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos $k-\epsilon$ /FRC/DT.

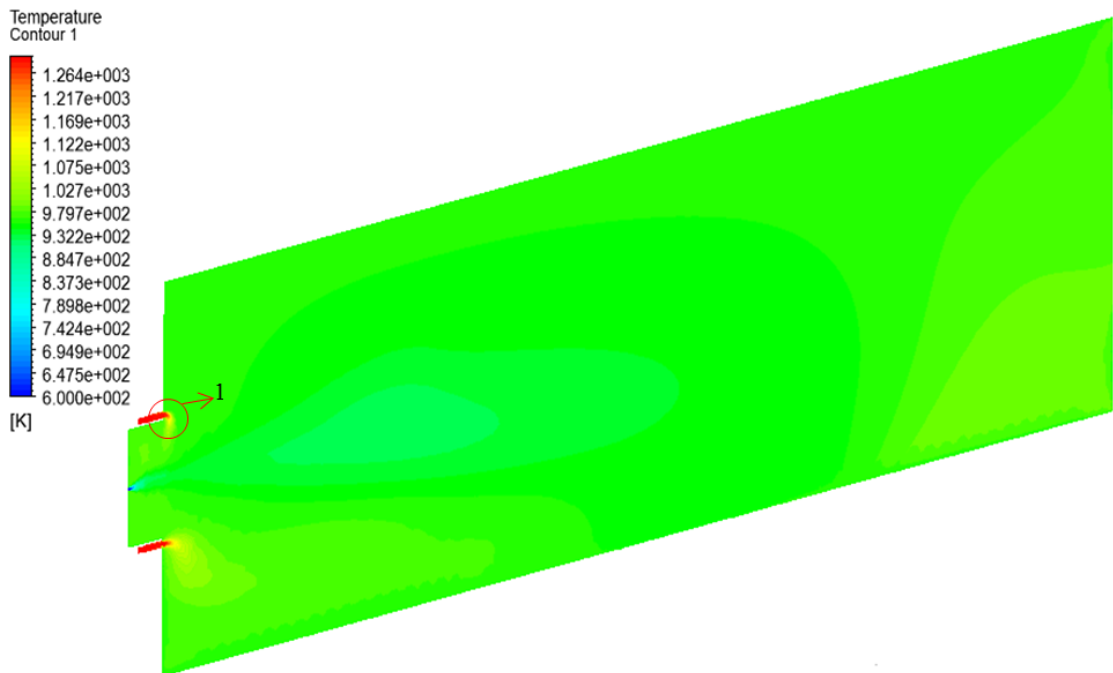


Figura 4.8 – Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para os modelos $k-\epsilon$ standard/FRC/DT.

Uma investigação em cima do campo de velocidades apresentado na Figura 4.9 revela a formação de pontos de escoamento reverso no interior da câmara (pontos 1 e 2, Fig. 4.9) resultantes dos vórtices pontuais (pontos 3 e 4, Fig. 4.9) que se encontram na região próxima à exaustão, o que reforça a idéia que os escoamentos reversos podem estar associados à modelagem de turbulência.

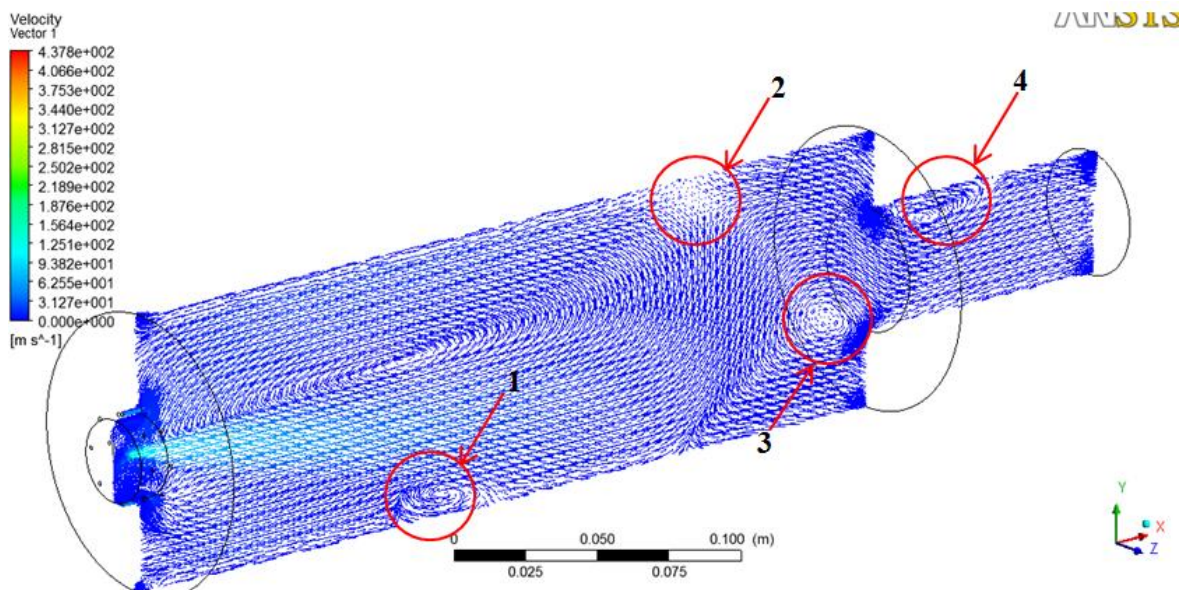


Figura 4.9 - Campo de velocidades gerado no interior da câmara de combustão para os modelos $k-\epsilon$ /FRC/DT.

4.1.2.3 – Simulação 3: k-ε standard/FRC/EDC/DT

Os resultados obtidos nesta modelagem não apresentaram muita diferença dos valores obtidos na Simulação 2 com o modelo de combustão FRC. As temperaturas nos pontos de medição não ultrapassam os 700°C, com gradiente de temperatura no interior da câmara da ordem de 180°C valor próximo ao experimental que é aproximadamente 200°C. A temperatura na região de injeção de ar de combustão também se manteve em torno de 1000°C, valor bem acima do experimental que é 730°C. A distribuição de temperatura ao longo das posições axiais também mantêm o comportamento encontrado na Simulação 2, isto é, os valores numéricos tendem a aumentar a partir das posições axiais 140 e 200 mm, sendo que deveriam cair conforme os resultados numéricos (Ver Figura 4.10).

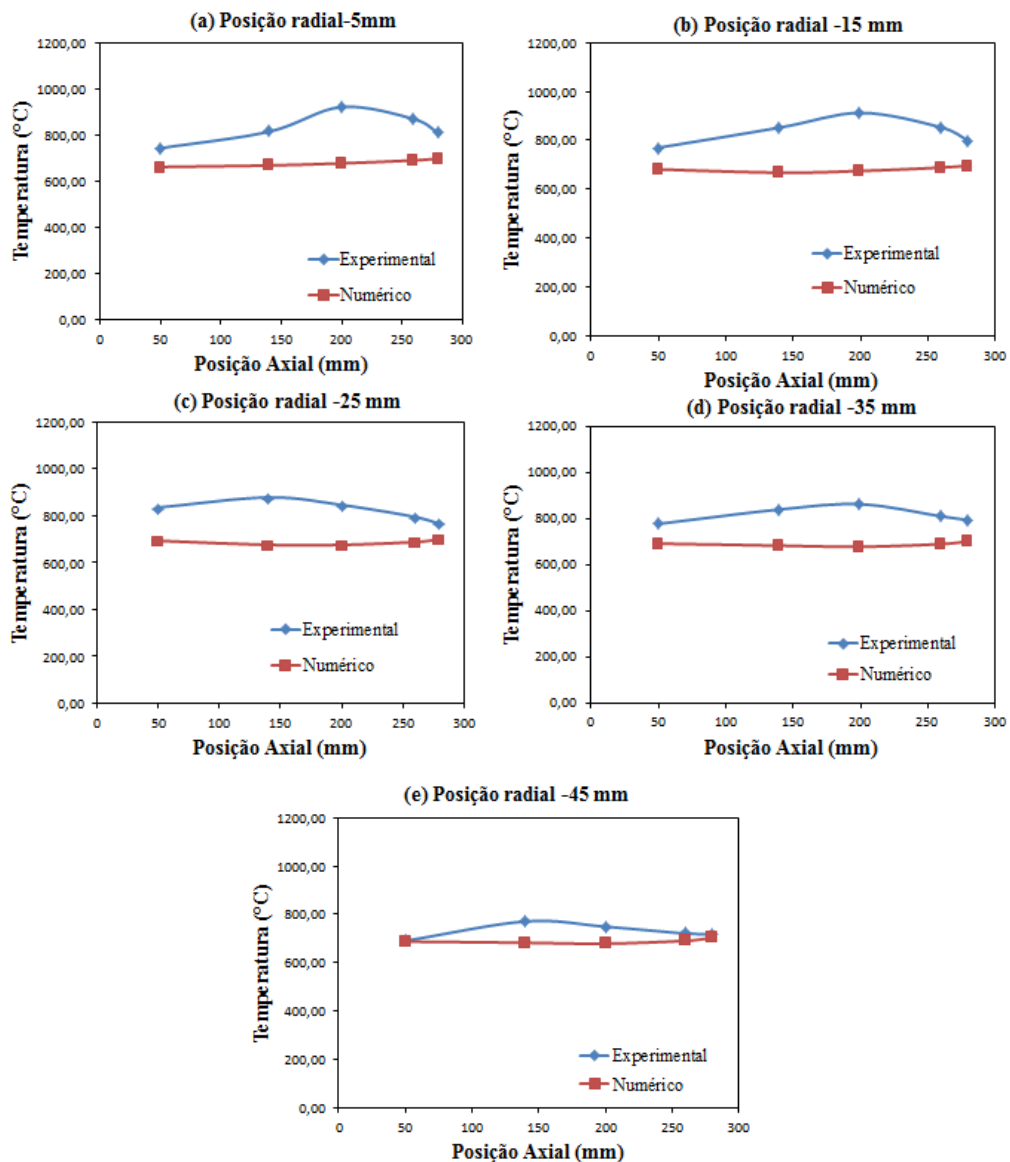


Figura 4.10 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos k-ε/FRC_EDC/DT.

4.1.2.4 – Simulação 4: RNG k- ϵ /FRC/DT

Para uma análise mais global da distribuição de temperaturas no interior da câmara e da influência da modelagem de turbulência foram realizadas simulações com o modelo RNG k- ϵ , para os modelos de combustão FRC e FRC/EDC. O modelo EDC não será apresentado por apresentar comportamento aproximado ao da Simulação 1 com temperaturas em torno de 1000°C nos pontos de medição e temperaturas acima de 1700°C na região de injeção de combustível. Portanto a partir da presente simulação o modelo de combustão EDC será descartado das análises.

A Figura 4.11 mostra que os resultados para os modelos RNG k- ϵ /FRC/DT começam a apresentar mudanças no comportamento do perfil de temperaturas. Para as posições radiais -5, -15 e -45 mm (ver Figs. 4.11.a, b e e, respectivamente) os valores de temperatura numéricos se aproximam dos experimentais, com um perfil bem próximo a partir da posição axial 140 mm principalmente na região de exaustão onde os valores de temperatura começam a diminuir, conforme ocorre no experimento. Nas posições radiais -25 e -35 mm (ver Fig. 4.11.c e d, respectivamente) os valores numéricos se afastam consideravelmente dos experimentais, o que pode ser influência do campo de velocidades nestas regiões da câmara que afetam a distribuição de combustível nesta área.

O gradiente de temperatura no interior da câmara é aproximadamente 200°C e os valores da temperatura nas proximidades da região de injeção do ar de combustão é da ordem de 870°C (Ponto 1, Fig. 4.12), valores estes bem próximos aos experimentais, que equivalem a 200°C para o gradiente de temperatura e 730°C para a temperatura nas proximidades da região de injeção do ar de combustão. Estes valores mostram que o modelo de turbulência influencia fortemente na obtenção regime de combustão sem chama, pois a aplicação do modelo RNG k- ϵ aproximou mais os perfis de temperatura numéricos dos valores reais, promovendo condições mais propícias para atingir este regime de combustão.

Na Figura 4.13 nota-se a existência de apenas uma região com fluxo reverso (ponto 1, Fig. 4.13) resultante do vórtice pontual localizado na região de exaustão da câmara (ponto 2, Fig. 4.13). Isto mostra que a formação de escoamento reverso encontrada nas simulações realizadas até o presente momento está associada à modelagem de turbulência, pois houve melhora nos resultados numéricos ao se adotar o modelo de turbulência RNG k- ϵ .

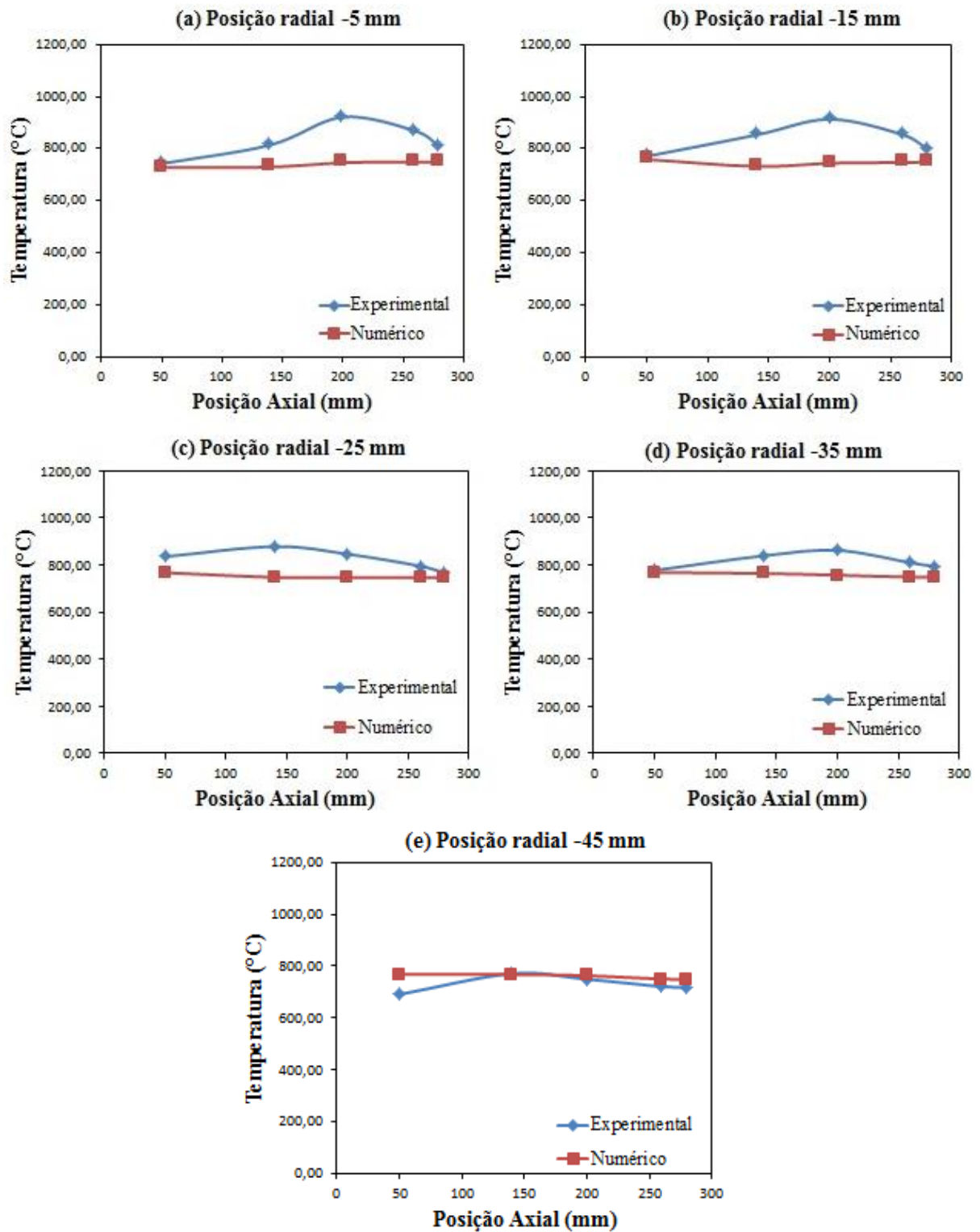


Figura 4.11 – Distribuição de temperatura ao longo da câmara para os pontos dispostos na malha de medição definidos por Azevedo (2013) para os modelos RNG k- ϵ /FRC/DT.

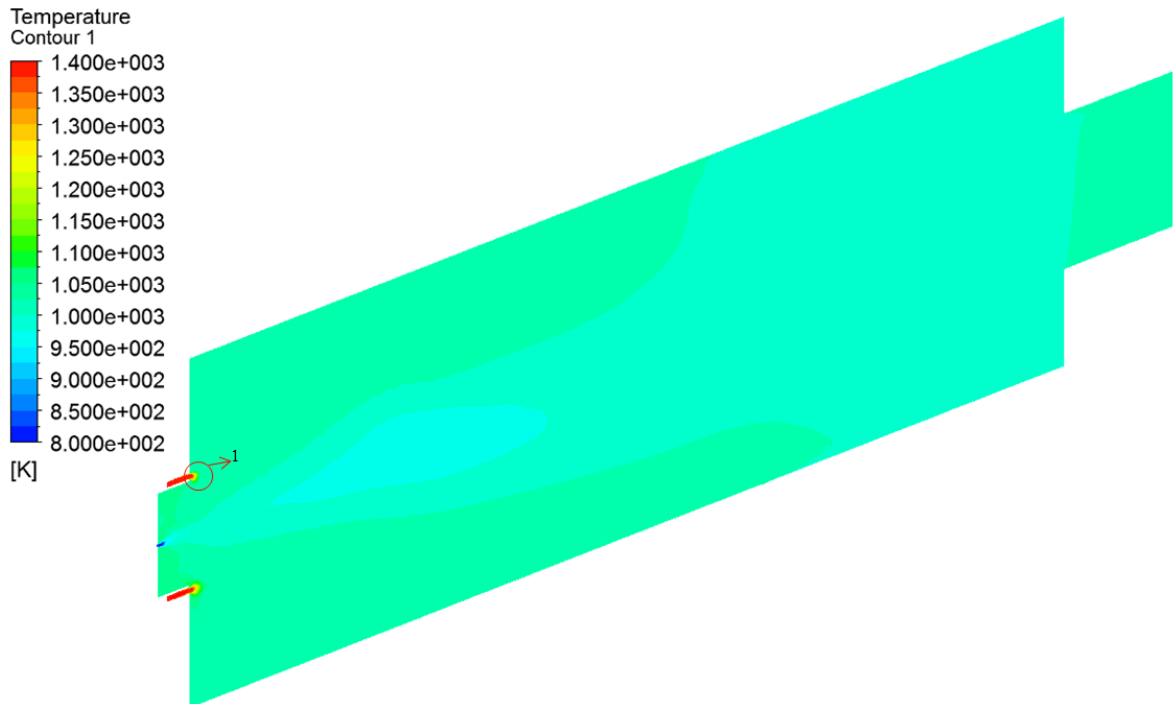


Figura 4.12 - Distribuição de temperatura no interior da câmara de combustão para os modelos RNG k- ϵ /FRC/DT

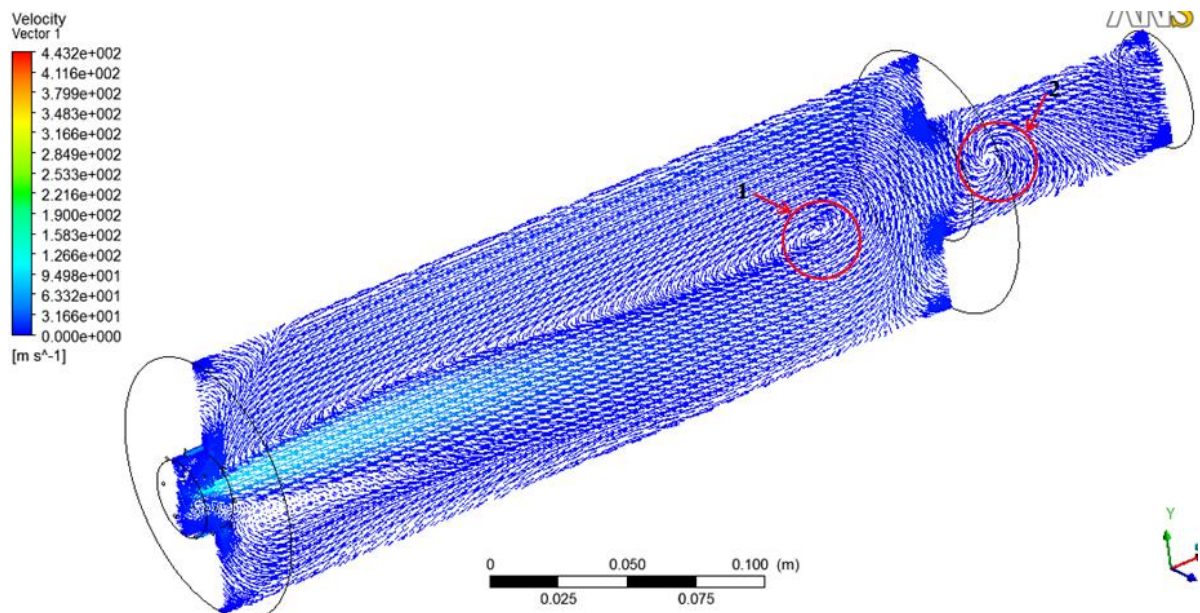


Figura 4.13 - Campo de velocidades gerado no interior da câmara de combustão para os modelos RNG k- ϵ /FRC/DT.

4.1.2.5 – Simulação 5: RNG/FRC/ED/DT

Na Simulação 5 os valores obtidos para a distribuição de temperatura não tiveram diferença significativa frente aos resultados obtidos na Simulação 4, com um desvio médio de

10% entre os valores obtidos. Os perfis de temperatura se sobrepõem quando comparados na Figura 4.14.

Nas simulações 2 e 3 foi observado a mesma característica encontrada nas simulações 4 e 5, quando comparadas as distribuições de temperatura para os modelos de combustão FRC e FRC/EDC. Na modelagem de combustão via FRC/EDC as taxas de reação são calculadas para cada modelo separadamente e então o valor mínimo obtido entre os dois é utilizado (ANSYS INC. 2011).

Como os valores de temperatura obtidos com o modelo de combustão FRC/EDC tendem aos valores gerados pelo FRC de onde é possível afirmar que o escoamento reativo simulado para o problema em estudo é limitado pela cinética química.

Com base na característica do modelo FRC/EDC de calcular as taxas de reação levando em conta separadamente o equacionamento de cada um dos dois modelos, ele será utilizado para o desenvolvimento das simulações finais, pois desta forma é possível garantir uma melhor representação da interação química e turbulenta do processo, bem como resultados mais precisos.

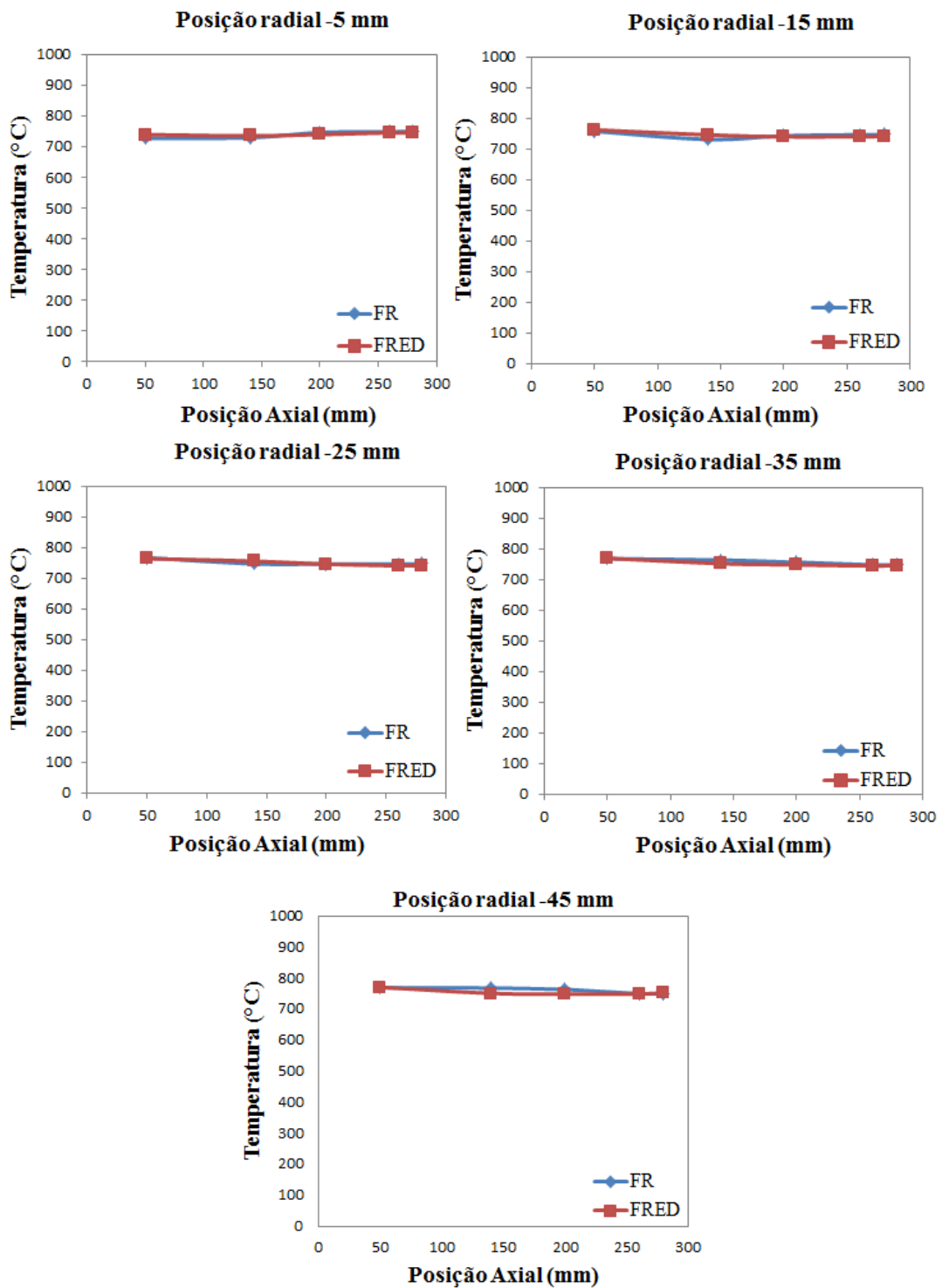


Figura 4.14 – Comparação entre os resultados numéricos para os modelos de combustão FRC e FRC/EDC.

4.2 – Modelagem do Spray de Etanol Hidratado

Para a injeção de etanol na câmara de combustão foi utilizada uma aproximação disponível no ANSYS CFX para este tipo de simulação. O spray turbulento foi injetado através da modelagem de cone com quebra primária de gotas para o qual foram necessários os

dados experimentais de Azevedo (2013): ângulo do cone do spray, vazão mássica de combustível, velocidade do ar na região de injeção do spray e temperatura do combustível, conforme citado anteriormente. Com base nestes dados foi possível gerar o spray turbulento e para validação desta modelagem foi tomado como parâmetro de comparação o diâmetro da gota formada no spray.

Para as simulações realizadas foi utilizada uma razão ar/líquido para o spray $ALR = 1$ ($m_{ar} = 0,08$ (g/s) e $m_{líquido} = 0,08$ (g/s)) para a qual o $SMD_{EXPERIMENTAL}$ correspondente vale $10,23 \mu\text{m}$.

Na Figura 4.15 são representados os sprays gerados pelos modelos de turbulência k- ϵ (Fig. 4.15.a) e RNG k- ϵ (Fig. 4.15.b) onde se observa que as condições iniciais consideradas nas simulações levam a altas velocidades no campo de escoamento das gotas do spray. Para os dois modelos analisados a única diferença encontrada é a distribuição espacial do spray que mostra um comportamento melhor para o modelo RNG k- ϵ atingindo uma distância maior no interior da câmara e possuindo forma simétrica mantendo as maiores velocidades na região central do spray. Esta pode ser uma das condições que diminui a chance da formação de escoamento reverso por fazer com que o escoamento se desenvolva de forma mais uniforme na direção do eixo central da câmara, conforme visto no item 4.1.4.

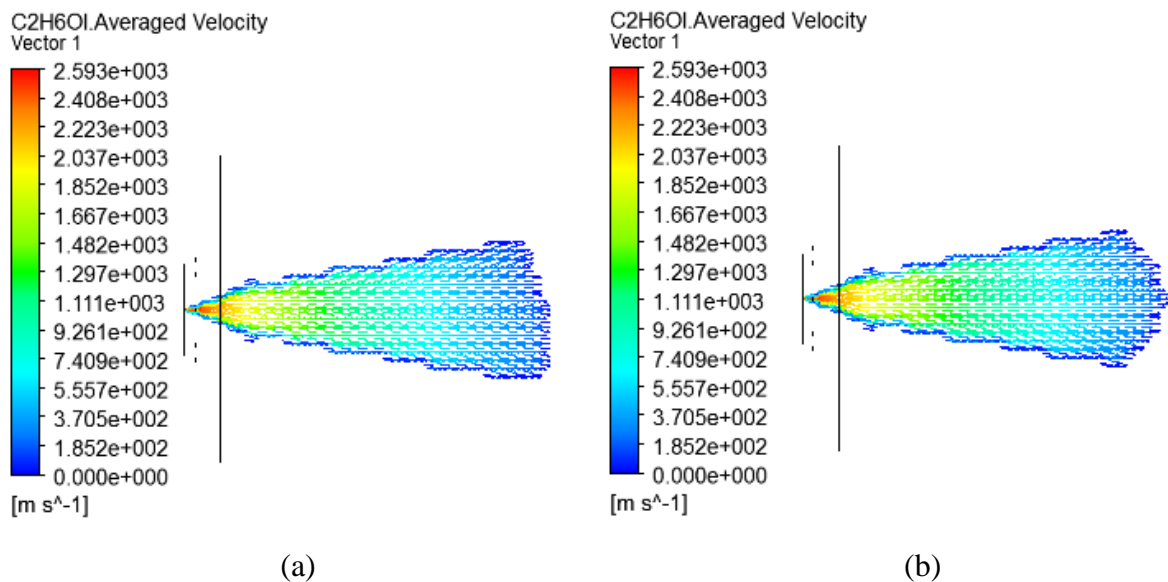


Figura 4.15 – Comparação entre o spray formado para os modelos de turbulência: (a) k- ϵ e (b) RNG k- ϵ .

Outro parâmetro analisado foi o SMD das partículas fluidas. Na Tabela 4.2 são apresentados os valores obtidos. Para o modelo k- ϵ tem-se $SMD = 8,63 \mu\text{m}$ e para o RNG k- ϵ obteve-se $SMD = 8,94 \mu\text{m}$. Considerando os erros associados a resíduos numéricos presentes

em simulações, os valores obtidos estão bem próximos ao experimental que é igual a 10,23 μm .

De forma geral pode-se dizer que para a modelagem de spray utilizada que o DPM é satisfatório não só pelo SMD das partículas e do comportamento do spray formado, mas o que confirma de fato a potencialidade desta modelagem é a distribuição de temperaturas no interior da câmara que é condizente com os resultados experimentais.

Tabela 4.2 – Comparação entre o $\text{SMD}_{\text{EXPERIMENTAL}}$ e o $\text{SMD}_{\text{NUMÉRICO}}$ para os modelos de turbulência k- ϵ e RNG k- ϵ .

ALR = 1	SMD (μm)
EXPERIMENTAL	10,23
k- ϵ	8,63
RNG k- ϵ	8,94

4.3 – Resultados Numéricos e Discussões

Com base nos resultados obtidos na primeira parte do estudo para validação da modelagem numérica (Itens 4.1 e 4.2) foram escolhidos os modelos de turbulência RNG k- ϵ , de combustão FRC/EDC e de discretização do spray DPM para realização das simulações finais do presente estudo. Outro ponto a ressaltar é a mudança do mecanismo de reação para o etanol, que na primeira parte foi utilizado o mecanismo de reação global com uma equação e nesta parte final foi substituído pelo mecanismo proposto por Verma (2004) que permite uma análise mais completa das emissões de poluentes e promove uma melhora na simulação da queima do etanol gerando resultados de distribuição de temperatura mais satisfatórios.

As simulações apresentadas a seguir serão nomeadas de acordo com a Tabela 4.1. Para todos os testes serão utilizados os modelos de turbulência RNG k- ϵ , de combustão EDC/FRC e o DPM na modelagem do spray. Para a modelagem de radiação foi fixado o modelo DT por ser um dos mais indicados para estudos envolvendo escoamentos reativos com partículas líquidas ou sólidas.

4.3.1 - Distribuição de Temperatura no Interior da Câmara de Combustão

Neste item processo de combustão sem chama será caracterizado com relação à distribuição espacial de temperaturas no interior da câmara. O perfil de distribuição de temperaturas experimental foi representado através de um programa computacional que utiliza interpolação cúbica (Ver exemplo na Figura 4.16) não permitindo uma comparação por imagens entre os resultados numéricos e experimentais, cujas cores não representam o mesmo

espectro de radiação. Assim, será feita uma análise com gráficos para confrontar os valores numéricos obtidos nas simulações com os resultados experimentais disponíveis.

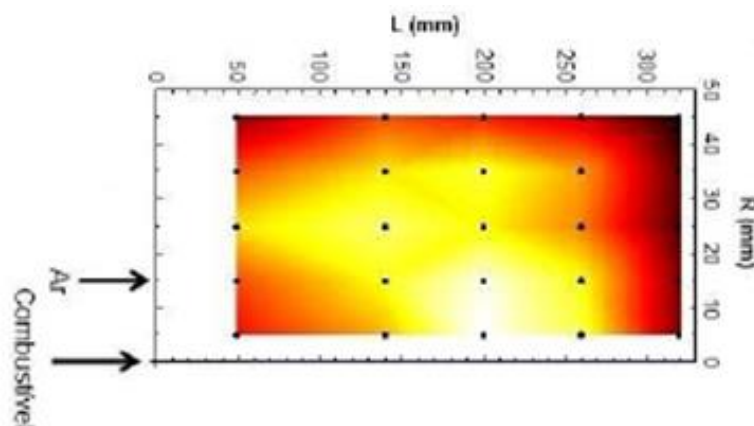


Figura 4.16 - Distribuição de temperatura para $\lambda = 1,65$ com a câmara de combustão operando a 2 kW (Azevedo, 2013).

4.3.1.1 – TESTE 1

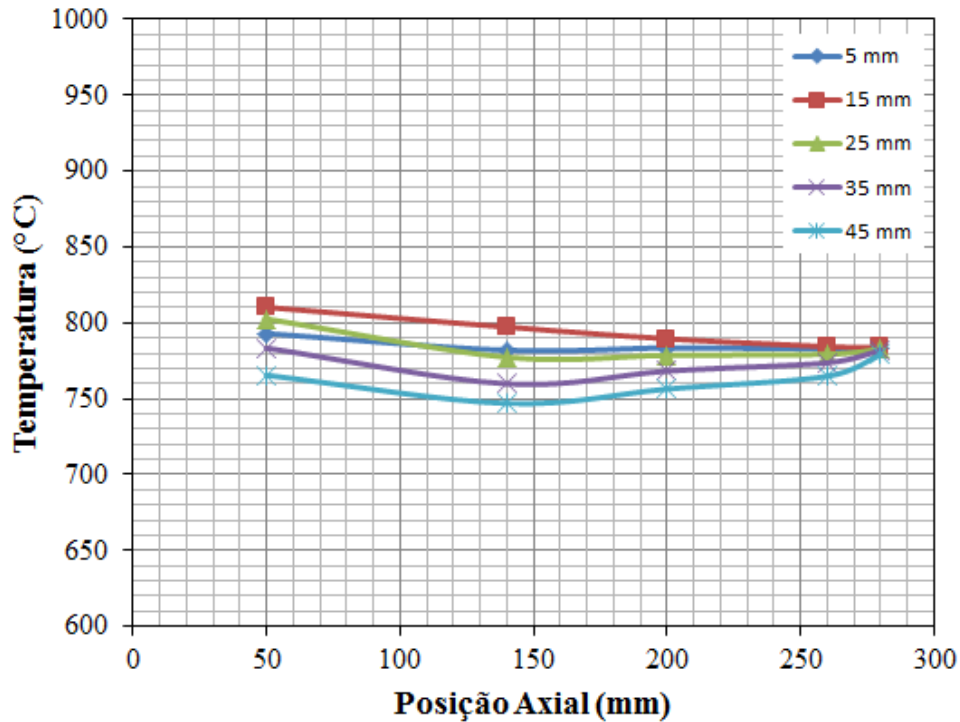
As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1 para o TESTE 1.

As Figuras 4.17.a e 4.17.b mostram a comparação entre os perfis de temperatura numérico e experimental para a câmara de combustão operando no regime de combustão sem chama. Os valores de temperatura numéricos variaram entre 747 e 802°C, enquanto os experimentais estão em uma faixa de 717 a 921°C, e apresentam uma distribuição praticamente uniforme na região onde se localiza a malha de medição de temperaturas experimental. Nota-se ainda uma queda de temperatura nas proximidades da região de exaustão, fato este que resulta da troca de calor por radiação com as paredes da câmara. O gradiente de temperatura numérico total da câmara de combustão não ultrapassou 160°C enquanto o experimental foi de aproximadamente 200°C.

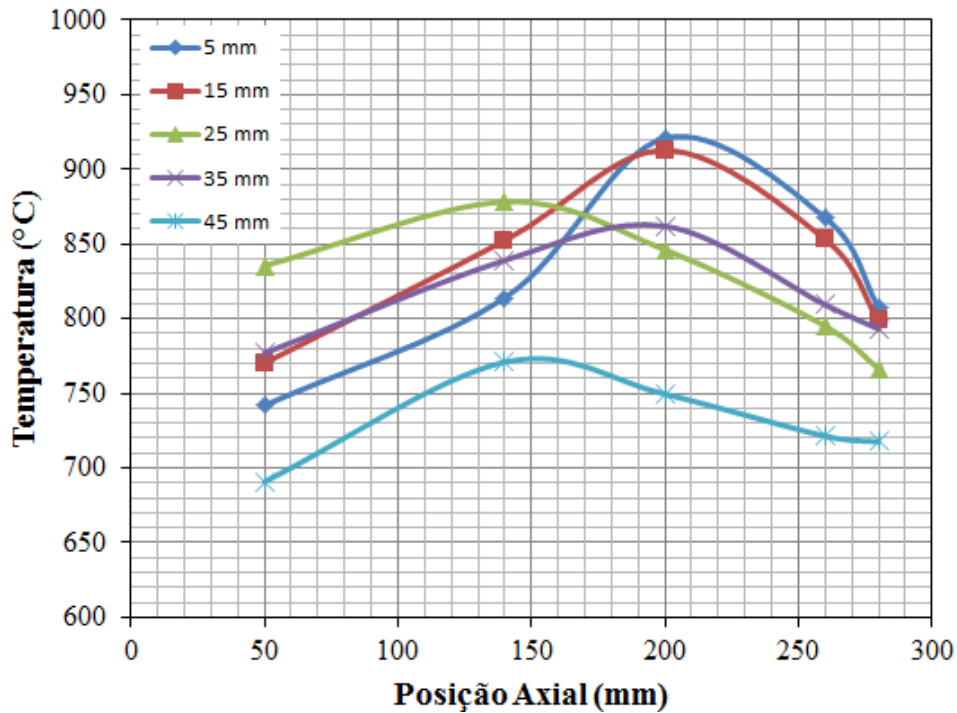
Na Figura 4.17 ainda se observa que as medidas temperatura nos pontos de medição localizados ao longo do eixo da câmara são um pouco maiores que aquelas medidas em regiões mais próximas à parede da câmara e que a variação de temperatura entre os pontos de medição são insignificantes. Estes fatos, assim como disposto em Özdemir et al., (2001), Szegö (2009) e Oliveira (2012), são comumente verificados em processos onde se identifica o regime de combustão sem chama.

Uma análise da Figura 4.18, que representa o campo de velocidades no plano médio da câmara de combustão, mostra que o modelo de turbulência RNG k- ϵ associado ao modelo DPM promoveu uma boa distribuição do combustível no interior da câmara, basta observar o

alcance do spray no interior da câmara e também a não formação de escoamento reverso o que favorece a evaporação do combustível e sua queima, resultando em uma zona de reação praticamente uniforme. Assim pode-se dizer para este caso que os resultados numéricos foram bastante satisfatórios quando comparados aos experimentais.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.17 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,65$ e potência de 2 kW.

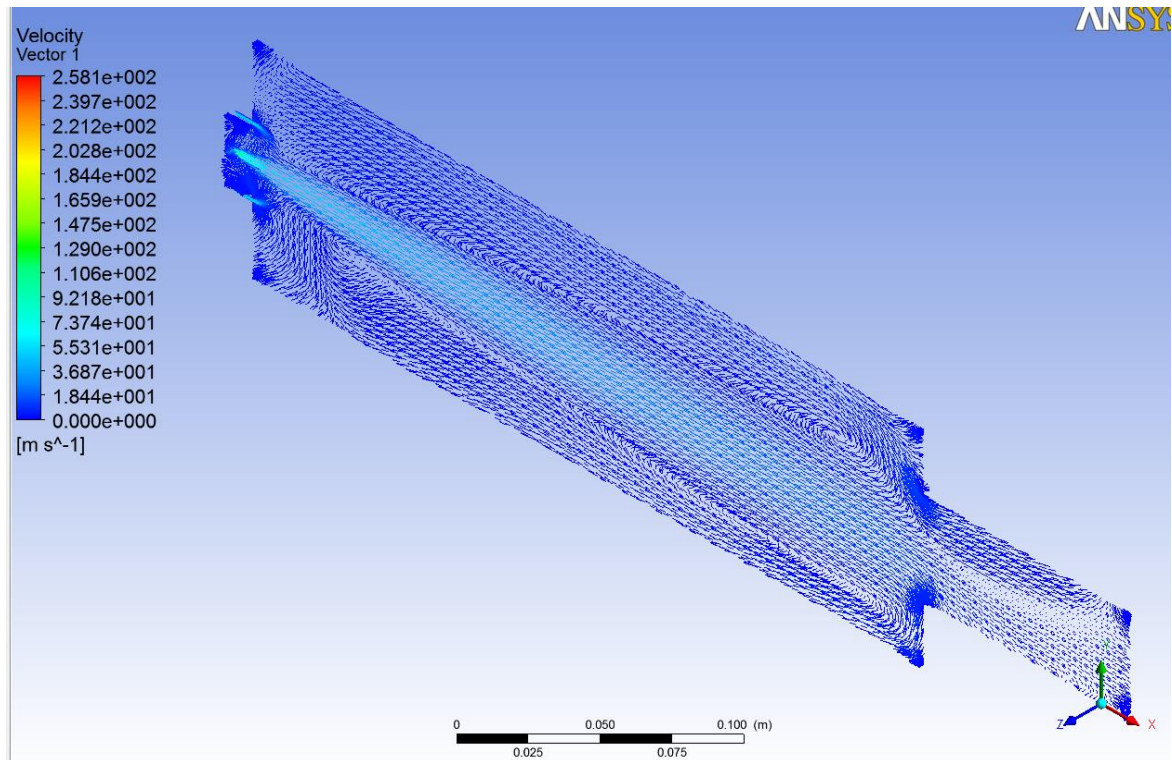


Figura 4.18 - Representação do campo de velocidades no plano médio da câmara de combustão.

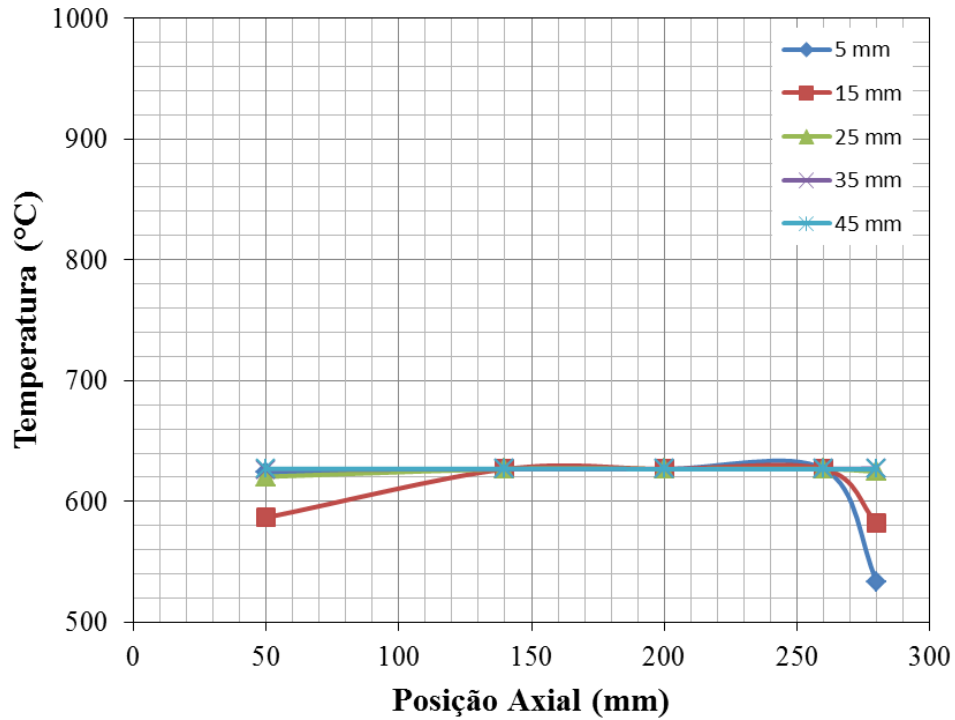
4.3.1.2 – TESTE 2

As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 2.

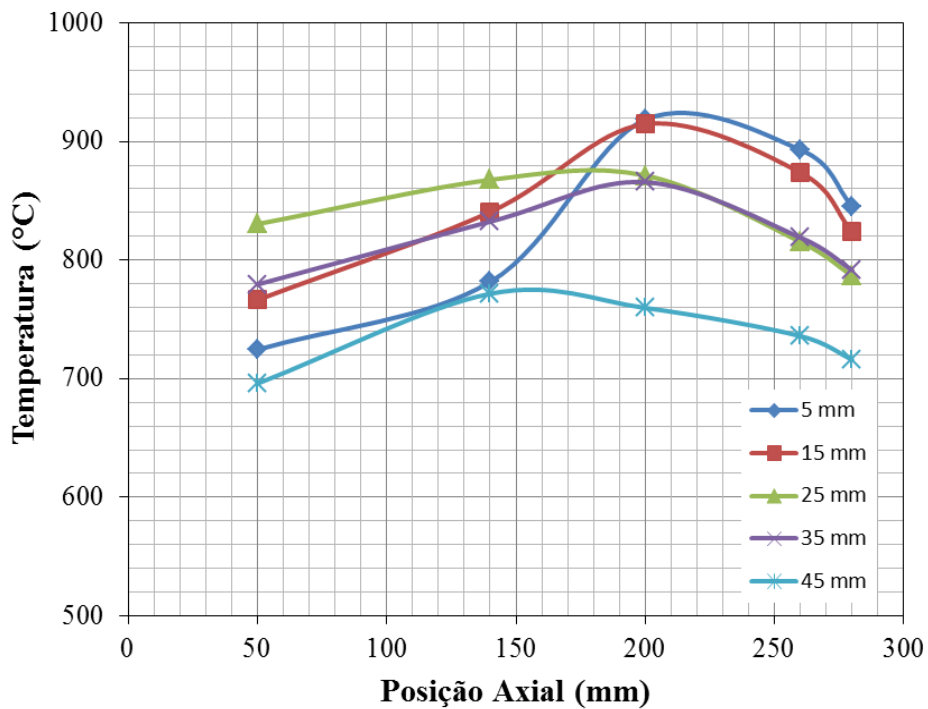
As Figuras 4.19.a e 4.19.b representam a comparação entre os perfis de temperatura numérico e experimental obtidos para a malha de medição da Figura 4.3, apresentada no início do presente capítulo.

Os valores de temperatura numéricos se encontram entre 530 e 630°C nos pontos de medição, enquanto os valores experimentais estão entre 715 e 915°C. O gradiente de temperatura numérico total na câmara de combustão é de 181,6°C, próximo ao experimental que é aproximadamente 200°C. Observa-se ainda na Figura 4.19 uma queda de temperatura nas proximidades da região de exaustão da câmara tanto para o perfil numérico quanto para o experimental, resultado da transferência de calor por radiação com as paredes da câmara.

Na Figura 4.19 também se observa que as medidas temperatura nos pontos de medição localizados ao longo do eixo da câmara são um pouco maiores que aquelas medidas em regiões mais próximas à parede da câmara e que a variação de temperatura entre os pontos de medição são insignificantes, conforme discutido no item anterior.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.19 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 2,05$ e potência de 2 kW.

A uniformidade do perfil de temperatura e os baixos valores de temperatura obtidos, são justificados pelo aumento do excesso de ar que aumentou a taxa de recirculação dos gases de combustão propiciando uma zona de reação mais homogênea e bem distribuída ao longo do volume da câmara de combustão, assim como observado no TESTE 1. O campo de

velocidades para esta simulação apresenta o mesmo comportamento para o TESTE 1, com diferença apenas no valor de velocidade média que é de 31,3 m/s para o TESTE 1 e de 47,6 m/s para o TESTE 2, o que melhora a distribuição de temperatura para este último caso.

Com esta discussão, afirma-se que as condições operacionais da câmara permitiram o desenvolvimento do regime de combustão sem chama para a presente simulação mostrando que a modelagem numérica utilizada está respondendo positivamente, representando de forma adequada a interação química termodinâmica e turbulenta do escoamento reativo em estudo.

4.3.1.3 – TESTE 3

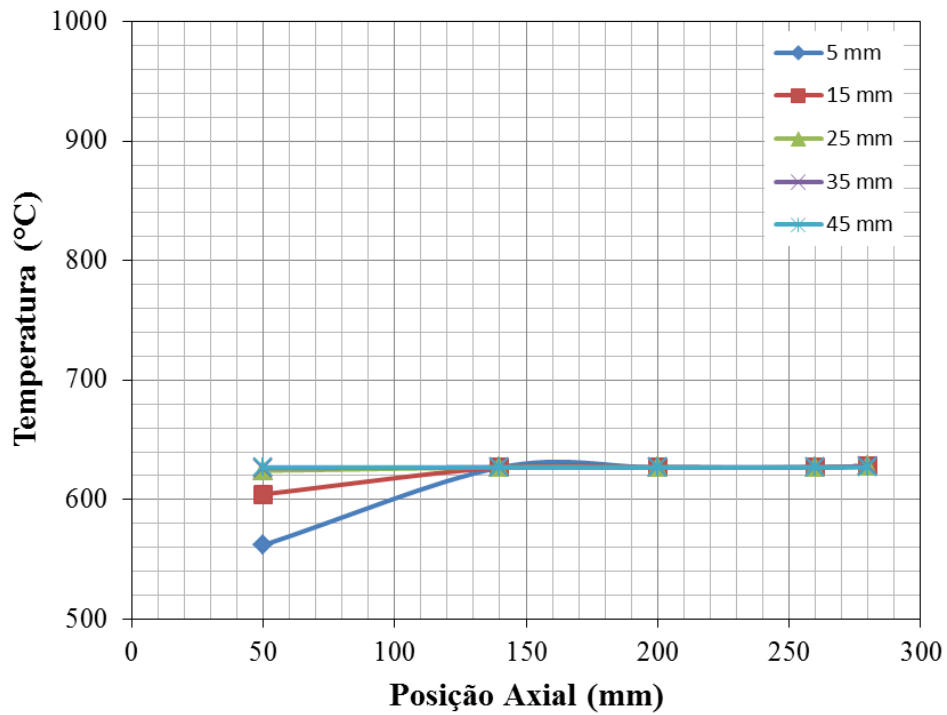
As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 3.

As Figuras 4.20.a e 4.20.b apresentam os perfis de temperatura no interior da câmara de combustão obtidos no TESTE 3, que tem valores numéricos de temperatura variando entre 560 e 650°C, enquanto os valores experimentais estão entre 700 e 930°C. Os perfis de temperatura numéricos e experimentais apresentam um comportamento aproximado com temperaturas menores na proximidade da região de injeção dos reagentes e aumento ao longo do comprimento da câmara, chamando atenção somente para o fato que na simulação numérica o perfil de temperatura se mantém aproximadamente uniforme, enquanto o perfil de temperatura numérico indica picos de temperatura na região central da câmara, fato também observado nos testes 1 e 2. Isso pode ser um indício de que durante os experimentos o regime de combustão sem chama não se manteve estável por um longo tempo durante o período de operação da câmara, perdendo suas características devido a alguma instabilidade do sistema e resultando em formação de chama na região central do combustor. Porém, para confirmação deste fato deve-se proceder com as demais análises dos testes numéricos realizados.

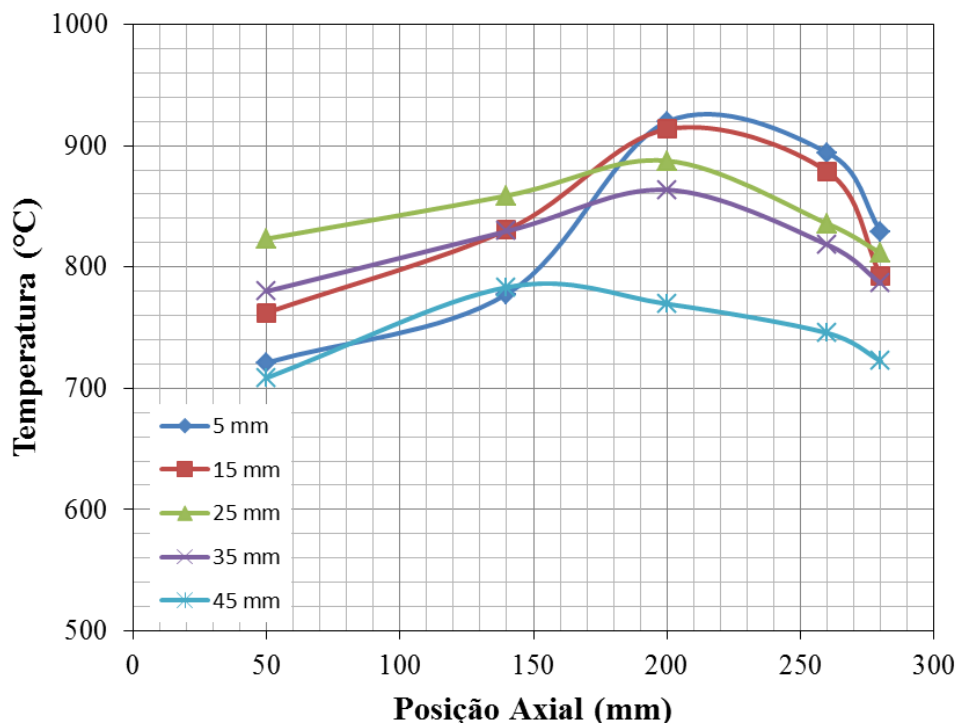
O gradiente de temperatura total numérico se manteve em torno de 200°C, valor igual ao experimental, e os valores de temperatura na direção radial da câmara também diminuem à medida que se aproximam da parede.

O aumento de λ levou a um aumento da taxa de recirculação dos gases de combustão, levando a velocidade no interior da câmara a valores de aproximadamente 66,02 m/s, promovendo uma boa diluição da mistura reagente e uma zona de reação bem distribuída, resultando em perfis de temperatura praticamente uniformes nas simulações numéricas.

Os resultados obtidos para a presente simulação mostram que os modelos numéricos escolhidos são bastante satisfatórios na representação do regime de combustão sem chama para as condições de operação da câmara definidas na Tabela 4.1.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.20 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 2,26$ e potência de 2 kW.

4.3.1.4 – TESTE 4

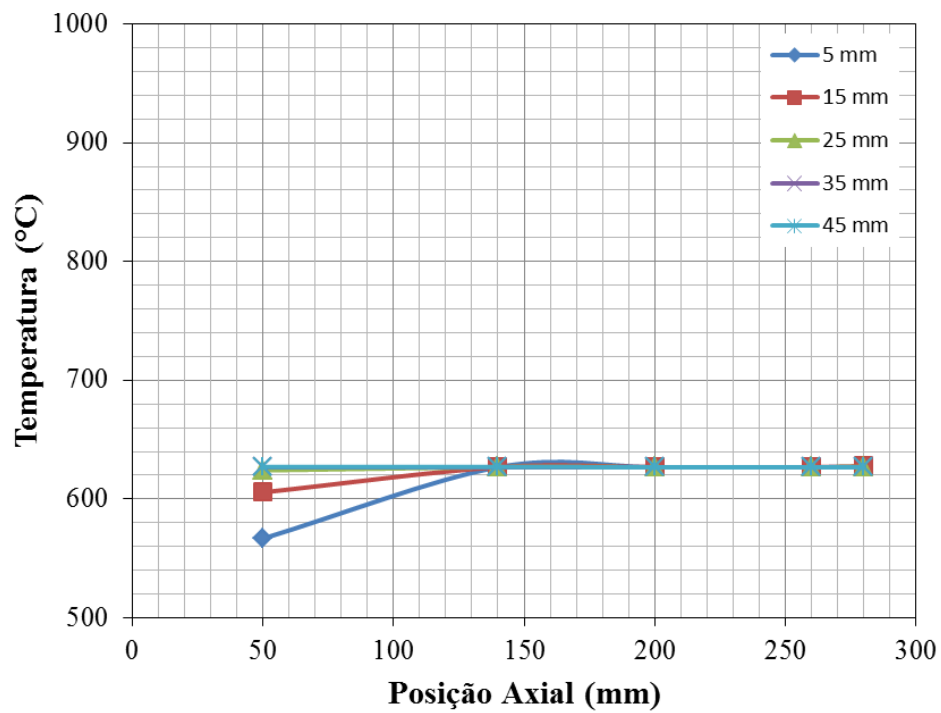
As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 4.

As Figuras 4.21.a e 4.21.b mostram os perfis de temperatura para obtidos no TESTE4, na qual se observa que o comportamento dos perfis de temperatura numéricos apresentam comportamento semelhante aos obtido nos testes anteriores, se mantendo uniformes ao longo da câmara e com valores entre 560 e 630°C, enquanto os valores experimentais variam de 720 a 930°C. Conforme observado nos testes anteriores para a potência de 2 kW os perfis de temperatura numéricos e experimentais mantiveram uma variação de valores aproximada para ambos os casos, o que mostra que as simulações numéricas estão representando bem o escoamento reativo em estudo.

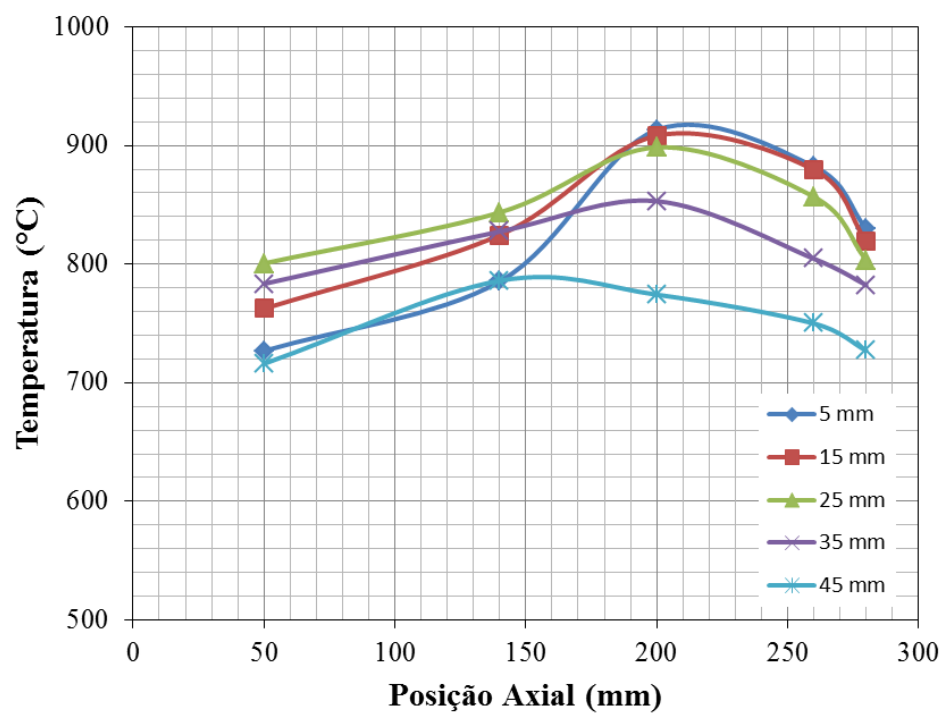
O gradiente de temperatura numérico foi de 163,7°C, próximo ao experimental que foi em torno de 200°C. Os valores de temperatura diminuem à medida que os pontos de medição na direção radial se aproximam da parede da câmara e também da região de exaustão dos gases de combustão, o que além de ser uma característica de sistemas que operam no regime de combustão sem chama, mostra a eficiência da modelagem de radiação pelo modelo de transferência discreta utilizado em todas as simulações desenvolvidas no presente trabalho.

O comportamento do campo de velocidades permanece o mesmo observado na Figura 4.18, porém com a velocidade atingindo o valor de 70,15 m/s devido ao aumento de λ , levando a uma maior taxa de recirculação dos gases da combustão e a diluição da mistura reagente gerando uma zona de reação bem distribuída e praticamente homogênea na atmosfera de combustão.

Assim como relatado no item anterior, enquanto os perfis de temperatura numéricos se mantêm praticamente uniformes na região onde a reação de combustão acontece, os perfis experimentais continuam apresentando picos de temperatura apresentando diferença de temperatura de até 100°C entre os pontos de medição na direção axial, como por exemplo, para a posição radial de -5 mm na Figura 4.21. Este comportamento será observado nas demais simulações a seguir e uma conclusão mais precisa será apresentada ao final da análises.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.21 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 2,45$ e potência de 2 kW.

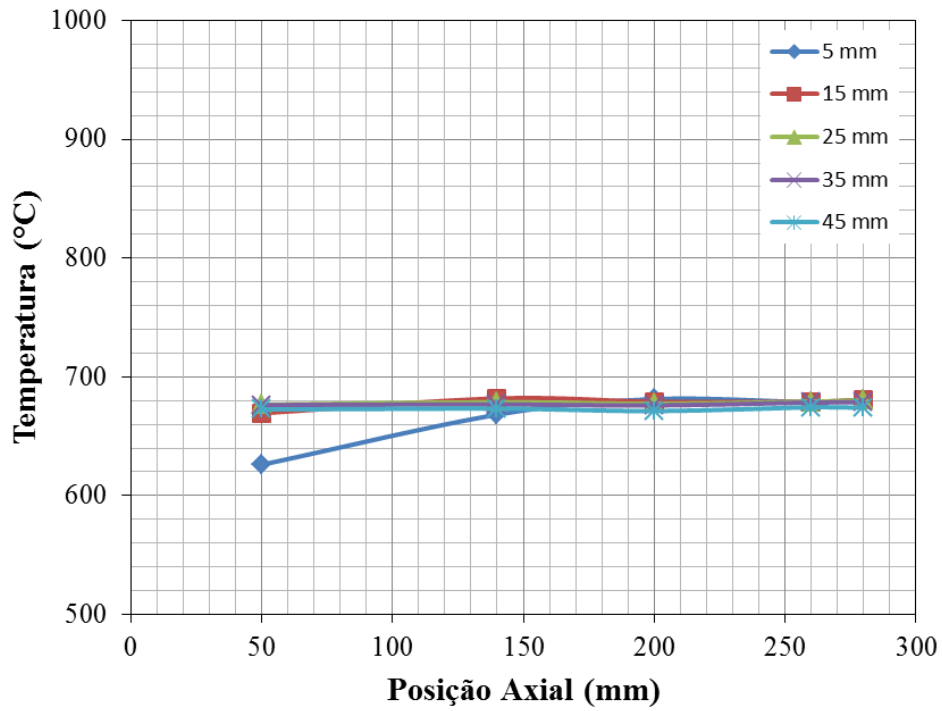
4.3.1.5 – TESTE 5

As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 5.

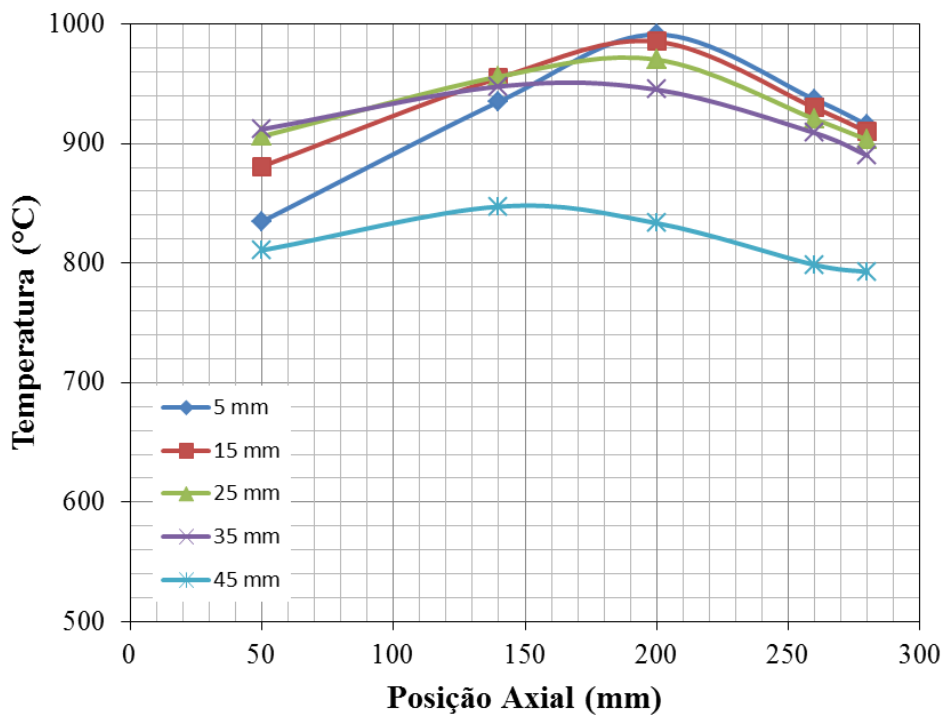
A Figura 4.22.a mostra os perfis de temperatura obtidos na simulação numérica do TESTE 5, na qual se observa que os valores de temperatura numéricos variam entre 600 e 700°C, enquanto os valores experimentais (Ver Figura 4.22.b) estão entre 800 e 1000°C. Os perfis de temperatura em ambos os casos apresentam temperaturas menores nas proximidades da região de injeção dos reagentes, aumento de temperatura à medida que se aproxima do centro e queda na temperatura nas proximidades da região de exaustão da câmara. No experimento a temperatura apresenta um pico na região central da malha de medição ($L = 200$ mm na Figura 4.3) e cai à medida que se aproxima da exaustão. Já os valores numéricos mostram um discreto aumento de temperatura até o centro da malha de medição ($L = 200$ mm na Figura 4.3) e se mantém praticamente uniforme nos demais pontos de medição, o que caracteriza a combustão sem chama.

O gradiente de temperatura numérico total foi de 171,7°C, próximo ao valor experimental que foi de 180°C. Outro ponto observado durante o levantamento da distribuição de temperaturas é que a temperatura diminui na direção radial nas proximidades da parede da câmara e também da região de exaustão. Estas características, junto às demais apresentadas anteriormente, evidenciam a formação do regime de combustão sem chama e mostram a eficiência do modelo de radiação DT na representação do escoamento reativo estudado.

A Figura 4.23 representa o campo de velocidades no plano médio da câmara de combustão, onde se observa que o spray se mantém distribuído na região central da câmara e uma alta taxa de recirculação dos gases com velocidade de 47,42 m/s, favorecendo a diluição entre os reagentes e os gases resultantes da combustão e gerando uma zona de reação bem distribuída ao longo do volume do combustor, que possibilita o desenvolvimento do regime de combustão sem chama.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.22 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,21$ e potência de 4 kW.

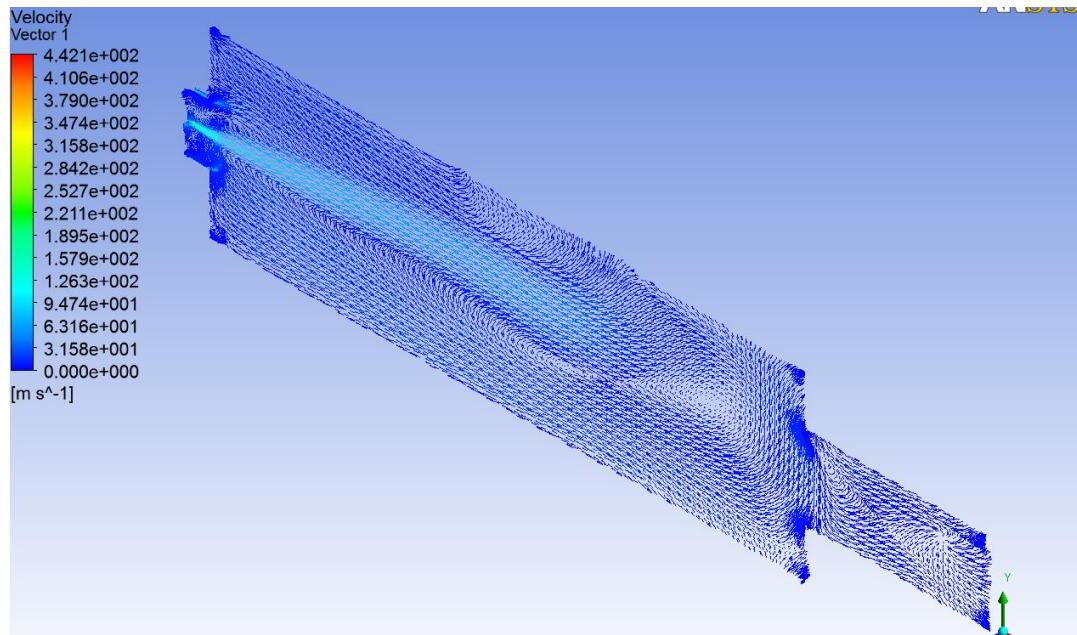


Figura 4.23 - Representação do campo de velocidades no plano médio da câmara de combustão operando com potência de 4 kW e $\lambda = 1,21$.

4.3.1.6 – TESTE 6

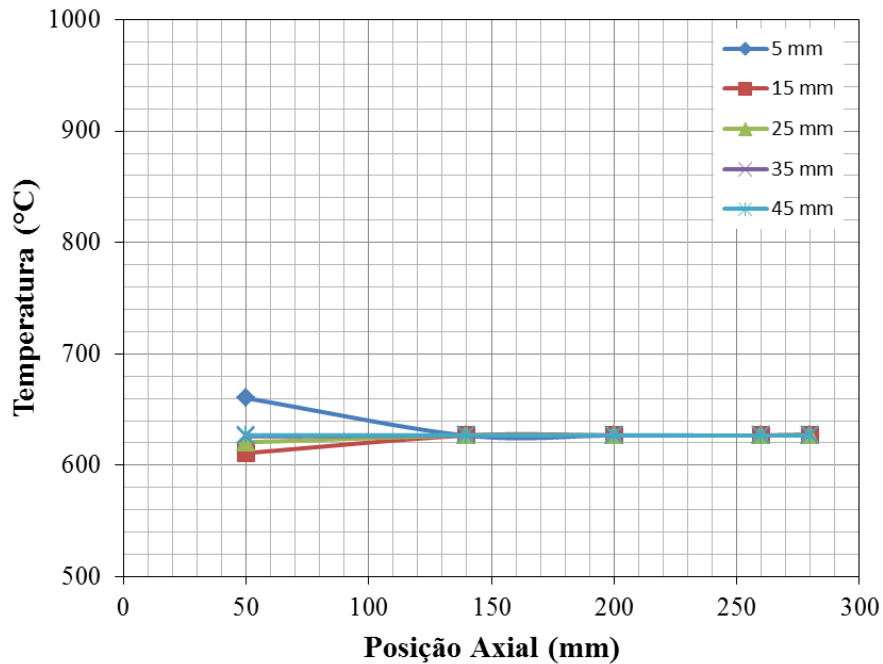
As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 6.

A Figura 4.24.a mostra os perfis de temperatura resultantes do TESTE 6 comparados aos perfis experimentais (Ver Fig. 4.24.b) de Azevedo (2013). Os valores de temperatura numéricos variam entre 600 e 700°C, enquanto os experimentais estão entre 800 e 1000°C. Os perfis numéricos apresentam uma distribuição de temperatura praticamente constante ao longo da malha de medição da Figura 4.3, com gradientes de temperatura insignificantes nesta região. Já o perfil experimental mostra picos de temperatura para a mesma região analisada, com variações de temperatura da ordem de 100 a 200°C entre os valores máximos e mínimos de temperatura. Assim como observado nos testes anteriores, pode-se dizer que houve formação de chama durante as realizações dos experimentos.

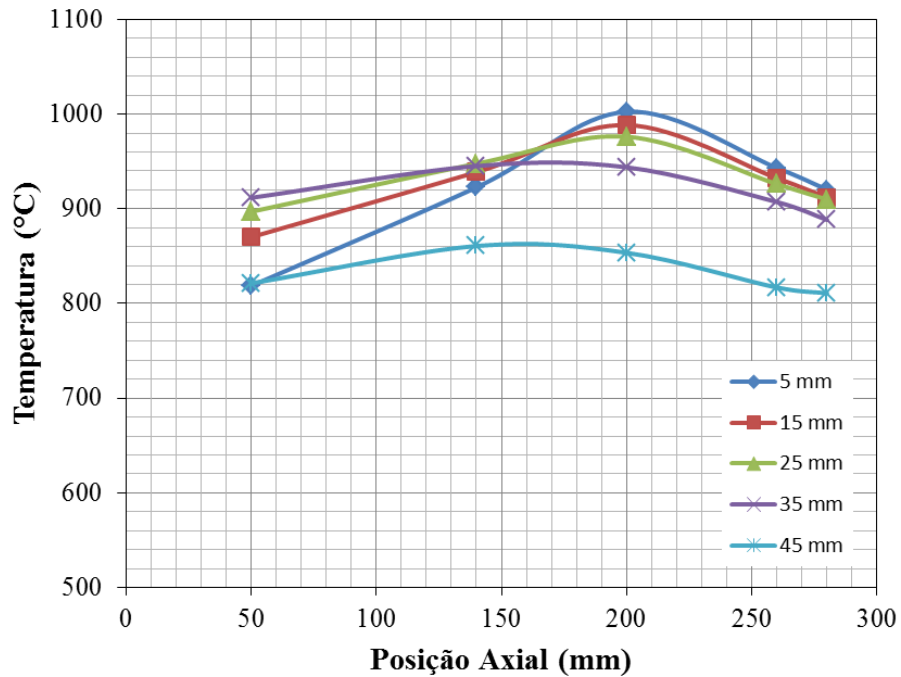
Outras características observadas nas simulações numéricas são a queda de temperatura na direção radial à medida que se aproxima das paredes da câmara e também uma discreta diminuição de temperatura nas proximidades da região de exaustão, com gradientes locais de temperatura praticamente desprezíveis. O gradiente de temperatura numérico foi de 168,36°C , próximo ao experimental que foi de 180°C.

O comportamento do campo de velocidades para o TESTE 6 é o mesmo apresentado na Figura 4.23 para o TESTE 5, a diferença é que o aumento de λ para 1,41 a velocidade no

interior da câmara é de 48,31 m/s, aumentando a taxa de recirculação dos gases de combustão e gerando um mistura homogênea entre os reagentes e os gases inertes da combustão. Com isso a reação de combustão se apresenta uniformemente distribuída na atmosfera de combustão e resultando nas características descritas acima, que caracterizam o regime de combustão sem chama para as condições de teste.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.24 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,41$ e potência de 4 kW.

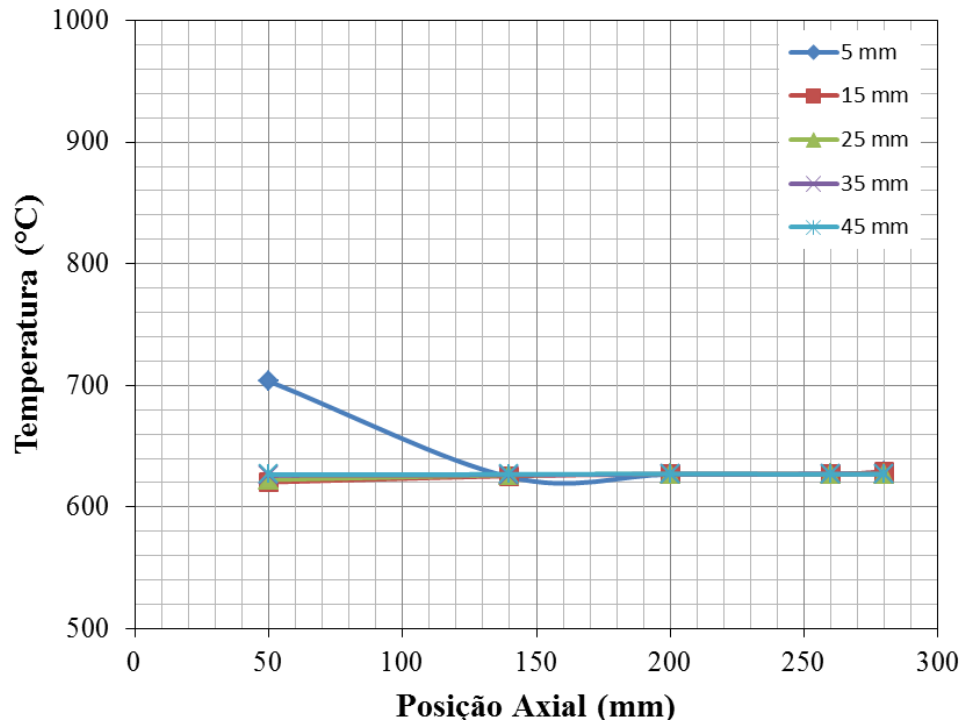
4.3.1.7 – TESTE 7

As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 7.

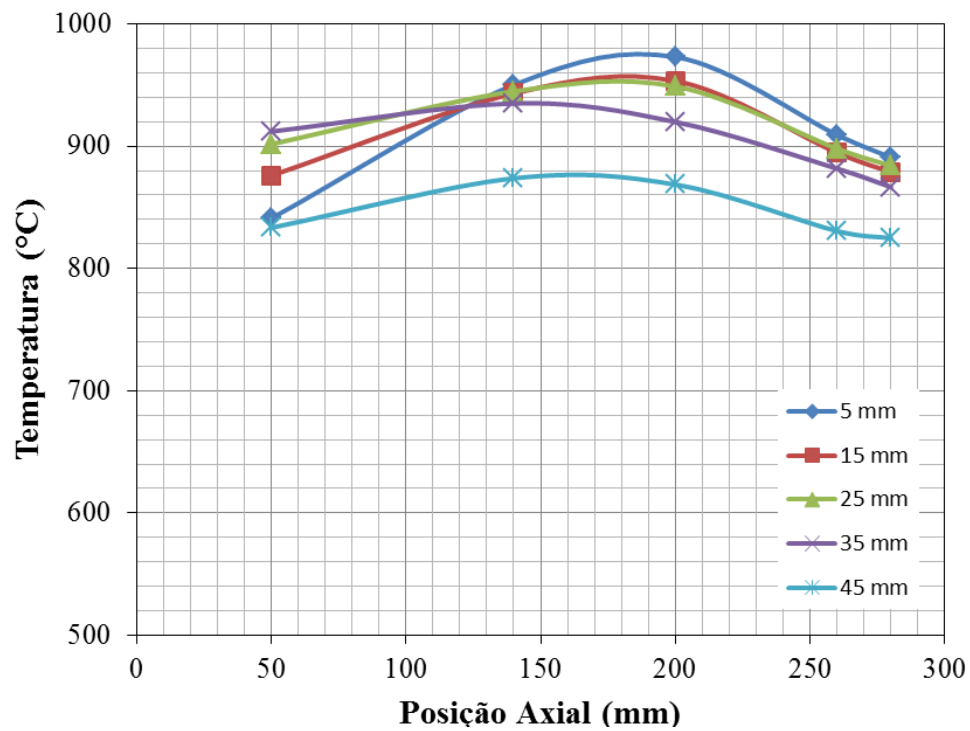
Os perfis de temperatura numéricos e experimentais são apresentados nas Figuras 4.25.a e 4.25.b, respectivamente, onde se observa que os valores numéricos variam entre 600 e 700°C, enquanto os experimentais se encontram entre 800 e 1000°C. Os perfis numéricos apresentam valores aproximadamente uniformes ao longo da câmara e gradientes de temperatura praticamente desprezíveis na região de medição, como observado nas simulações anteriores. Os perfis experimentais continuam apresentando picos de temperatura, com gradientes variando entre 100 e 150°C na região de medição.

O gradiente de temperatura numérico total foi de 107°C, enquanto o experimental foi de 140°C. O perfil radial de temperatura continua apresentando o comportamento de diminuir à medida que se aproxima da parede da câmara, o que caracteriza sistemas que operam no regime de combustão sem chama. Este comportamento mostra que o modelo de radiação DT é adequado para simulações envolvendo o regime de combustão sem chama aplicado a queima de partículas líquidas.

O aumento de λ para 1,61, provoca um aumento de velocidade no interior da câmara, que é de 78,24 m/s, elevando a taxa de recirculação dos gases de combustão, gerando uma mistura bem diluída entre estes e os reagentes e uma zona de reação bem distribuída no interior do combustor. A combinação destes fenômenos levam a formação do regime de combustão sem chama, caracterizado a partir das características obtidas na simulação numérica do TESTE 7.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

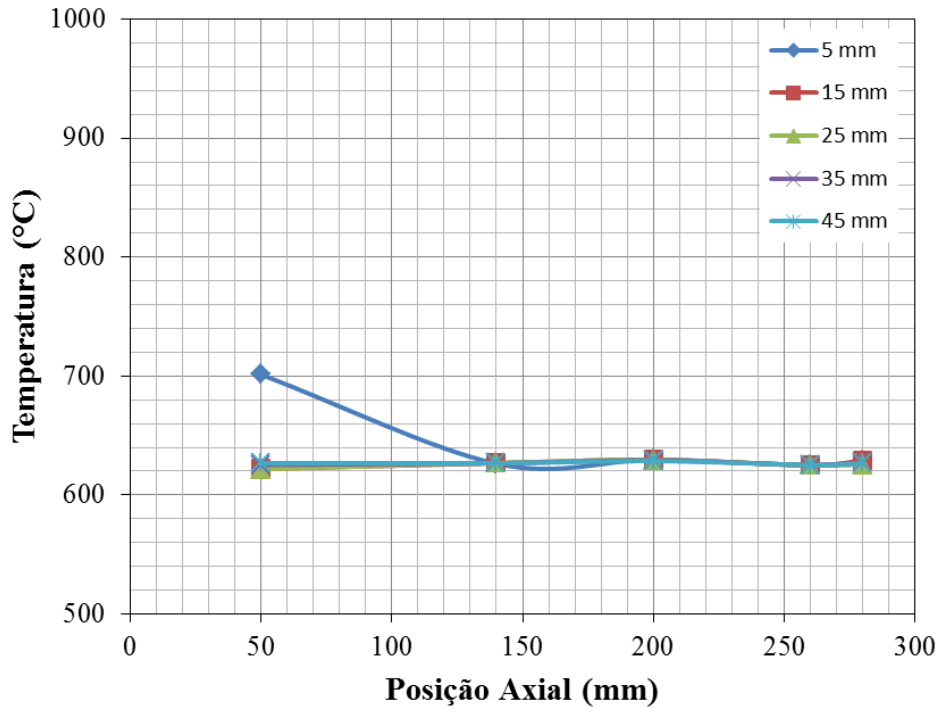
Figura 4.25 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,61$ e potência de 4 kW.

4.3.1.8 – TESTE 8

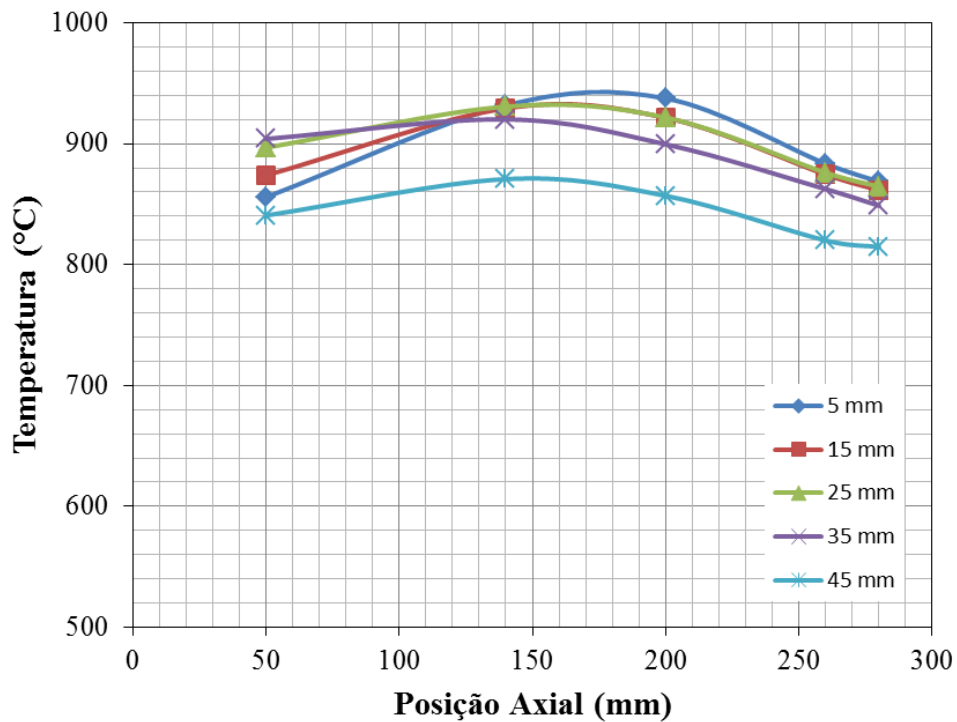
As condições iniciais para as simulações numéricas são apresentadas na Tabela 4.1, para o TESTE 8.

As Figuras 4.26.a e 4.26.b representam a comparação entre os perfis de temperatura numéricos e experimentais, respectivamente, para o TESTE 8. Os valores numéricos variaram entre 600 e 700°C e os experimentais estão entre 850 e 950°C. Na Figura 4.26 se observa que o perfil de temperatura numérico se mantém praticamente constante ao longo da região de medição de temperaturas, enquanto o perfil experimental apresentou uma mudança em relação aos testes 5, 6 e 7. Nota-se que os picos de temperatura experimentais são menos acentuados e a variação de temperatura entre os pontos de medição tendem a diminuir, o que denota um processo de transição para o regime flameless, o que poderia ser confirmado através da realização de novos experimentos. O gradiente de temperatura numérico total na câmara é 79,61°C, próximo ao experimental que é 97°C. Outra característica encontrada foi a diminuição da temperatura na direção radial à medida que se aproxima da parede da câmara.

O comportamento do campo de velocidades é o mesmo observado na Figura 4.23, porém o aumento de λ para 1,8 elevou a taxa de recirculação no interior da câmara, atingindo velocidades da ordem de 81,18 m/s, o que promove maior diluição entre os reagentes e os gases recirculantes no interior da câmara garantindo condições para desenvolvimento do regime de combustão sem chama, conforme observado nos resultados das simulações numéricas.



(a) Perfis de temperatura numéricos.



(b) Perfis de temperatura experimentais.

Figura 4.26 - Distribuição de temperatura ao longo da câmara de combustão para operando com $\lambda = 1,80$ e potência de 4 kW.

4.3.2 - Análise da Composição dos Gases na Exaustão da Câmara

A análise da distribuição de temperaturas no interior da câmara de combustão não é suficiente para validar a modelagem numérica aplicada nas simulações realizadas no presente

trabalho. É necessário também avaliar a composição dos gases de exaustão, que será crucial para caracterização do regime de combustão sem chama aplicada ao etanol.

Como já citado anteriormente, o mecanismo de reação escolhido para o etanol é composto por 70 reações elementares e 26 principais espécies químicas para a reação etanol/ar proposto por Verma (2004), o qual permite analisar as emissões de gases CO e NO no processo de forma direta, pois os mecanismos de reação disponíveis no ANSYS CFX para cálculo destas espécies não gerou resultados numéricos condizentes com os experimentais. Este mecanismo também permite analisar a emissões de UHC nas simulações o que não é possível fazer para o mecanismo de reação simples presente no ANSYS CFX.

Azevedo (2013) considerou para as medições das emissões a normalização da concentração de gases de exaustão corrigidas para 15% de O₂, conforme proposto por Arghode & Gupta (2010). Esta correção foi feita com o intuito de padronizar os valores de emissão de fontes diferentes para a mesma base e é dada pela Equação (4.1).

$$[A]_{BS,corr} = \frac{0,21 - [O_2]_{BS,corr}}{0,21 - [O_2]_{BS,real}} [A]_{BS,real} \quad (4.1)$$

Onde [A] é a concentração volumétrica do produto de combustão a ser corrigido, [O₂] é a concentração volumétrica de O₂ que é utilizada como referência e BS_{,real} e BS_{,corr} representam, respectivamente, as concentrações em base volumétrica seca medidas e corrigidas.

Nas Tabelas 4.3 e 4.4 são apresentados os níveis de emissões de poluentes obtidos nos testes numéricos para as potências de 2 e 4 kW, respectivamente, com suas concentrações já corrigidas para 15% de oxigênio.

Tabela 4.3 – Emissões de poluentes para a potência de 2 kW para os testes numéricos.

Teste	λ	CO ₂ (%)	NO _x (ppm)	UHC (ppm)	CO (ppm)
1	1,650	4,586	3,079	1,386	3,270
2	2,050	4,612	2,677	1,141	3,880
3	2,260	4,582	2,521	1,030	3,152
4	2,450	4,599	2,396	1,052	3,199

Tabela 4.4 – Emissões de poluentes para a potência de 4 kW para os testes numéricos.

Teste	λ	CO ₂ (%)	NO _x (ppm)	UHC (ppm)	CO (ppm)
5	1,210	4,122	2,279	2,276	9,380
6	1,410	4,118	2,203	1,929	9,972
7	1,610	4,106	2,221	1,672	7,624
8	1,800	4,108	2,106	1,587	6,648

As Figuras 4.27 e 4.28 apresentam as emissões CO_2 , NO_x , UHC e CO em função do coeficiente de excesso de ar para a câmara operando no regime de combustão sem chama a uma potência de 2 kW e 4 kW, respectivamente.

Observa-se nas Figuras 4.27 e 4.28 que há uma boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais para as emissões, que foram extremamente baixas para as condições de operação analisadas.

O aumento do coeficiente de excesso de ar promoveu uma redução nas emissões de UHC e CO. Isto acontece porque o aumento de λ implica em aumento da velocidade de entrada do ar de combustão, o que aumenta a taxa de recirculação dos gases no interior da câmara e, conseqüentemente, favorece uma boa mistura entre os reagentes e os gases inertes da combustão, provocando uma diminuição na concentração de UHC na exaustão do sistema.

O aumento na taxa de recirculação dos gases da combustão também causa uma diminuição da temperatura global na zona de reação melhorando significativamente a diluição de O_2 nesta região. Assim as reações de oxidação de CO são praticamente inibidas, causando uma queda drástica nas emissões deste quando comparado às emissões resultantes de processos de combustão convencionais.

Os níveis de NO_x para as simulações numéricas se mantiveram abaixo de 3,5 ppm para as condições operacionais a 2 e a 4 kW. Uma explicação para este fato é a distribuição quase uniforme de temperatura na atmosfera de combustão, que apresenta valores baixos, provocando a redução da formação de NO_x . O aumento de λ também influencia nesta redução, devido à melhor diluição da mistura reagente.

No presente estudo não há como definir o principal mecanismo de formação de NO_x , pois as reações para o NO_x são inseridas diretamente no mecanismo de reação utilizado nas simulações. Com base nos valores de temperatura pode-se concluir que a maior parte de NO_x é formado a partir do mecanismo imediato e do mecanismo N_2O .

Mancini et al., (2002) mostram em seu estudo que o mecanismo imediato é responsável pela formação de apenas 5% de NO_x , enquanto o restante é formado pelo mecanismo N_2O , sendo este último muito importante em sistemas de combustão que trabalham com baixas temperaturas para inibir a formação de NO térmico (Azevedo, 2013). Os mecanismos de formação de CO, UHC e NO_x são discutidos no Anexo A.

Nas Figuras 4.27 e 4.28 observa-se que o comportamento das curvas numérica e experimental para o CO_2 apresenta uma diferença, enquanto o perfil experimental aumenta de acordo com λ , o perfil numérico se mantém praticamente constante, porém ambos mostram a melhor eficiência de combustão de regime de combustão sem chama.

Para as emissões de CO (Ver Figs. 4.27.d e 4.28.d) há uma diferença considerável nas concentrações de CO para $\lambda = 1,65$ e $\lambda = 1,21$. Com base na proximidade dos valores de emissões obtidos para os elementos NO_x e UHC, deve ser levada em conta a possibilidade da realização de novos testes numéricos e experimentais para verificar o que está provocando a diferença entre as emissões numéricas e experimentais de CO e CO_2 .

De forma geral os baixos desvios entre os resultados numéricos e experimentais para as emissões, que variam de 5 a 10%, pode-se dizer que o mecanismo de reação associado aos demais modelos de combustão (FRC/EDC) e de turbulência (RNG k- ϵ), reproduziram satisfatoriamente o regime de combustão sem chama aplicado à queima do etanol.

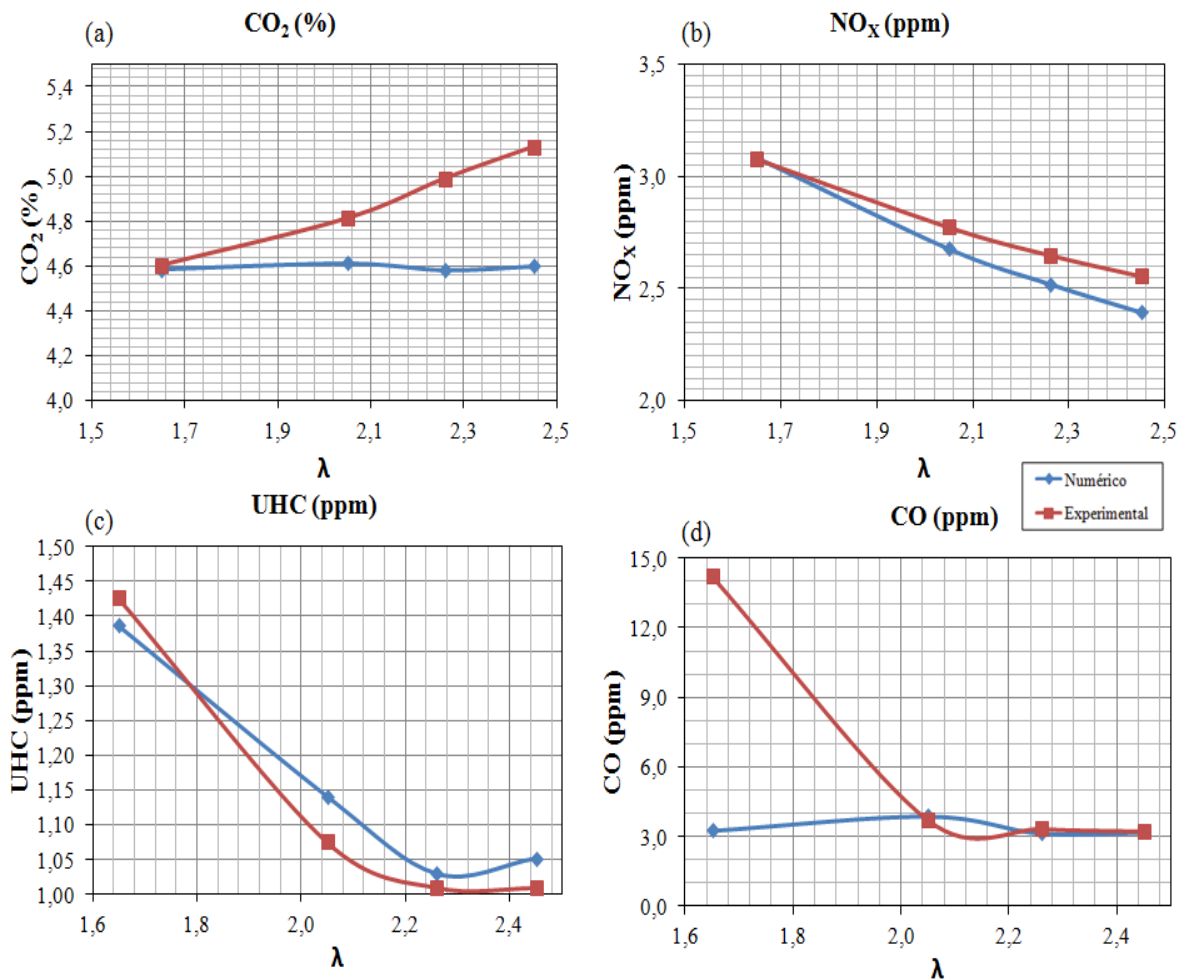


Figura 4.27 - Emissões dos gases de combustão em função do coeficiente de excesso de ar para a câmara operando no regime de combustão sem chama a uma potência de 2 kW.

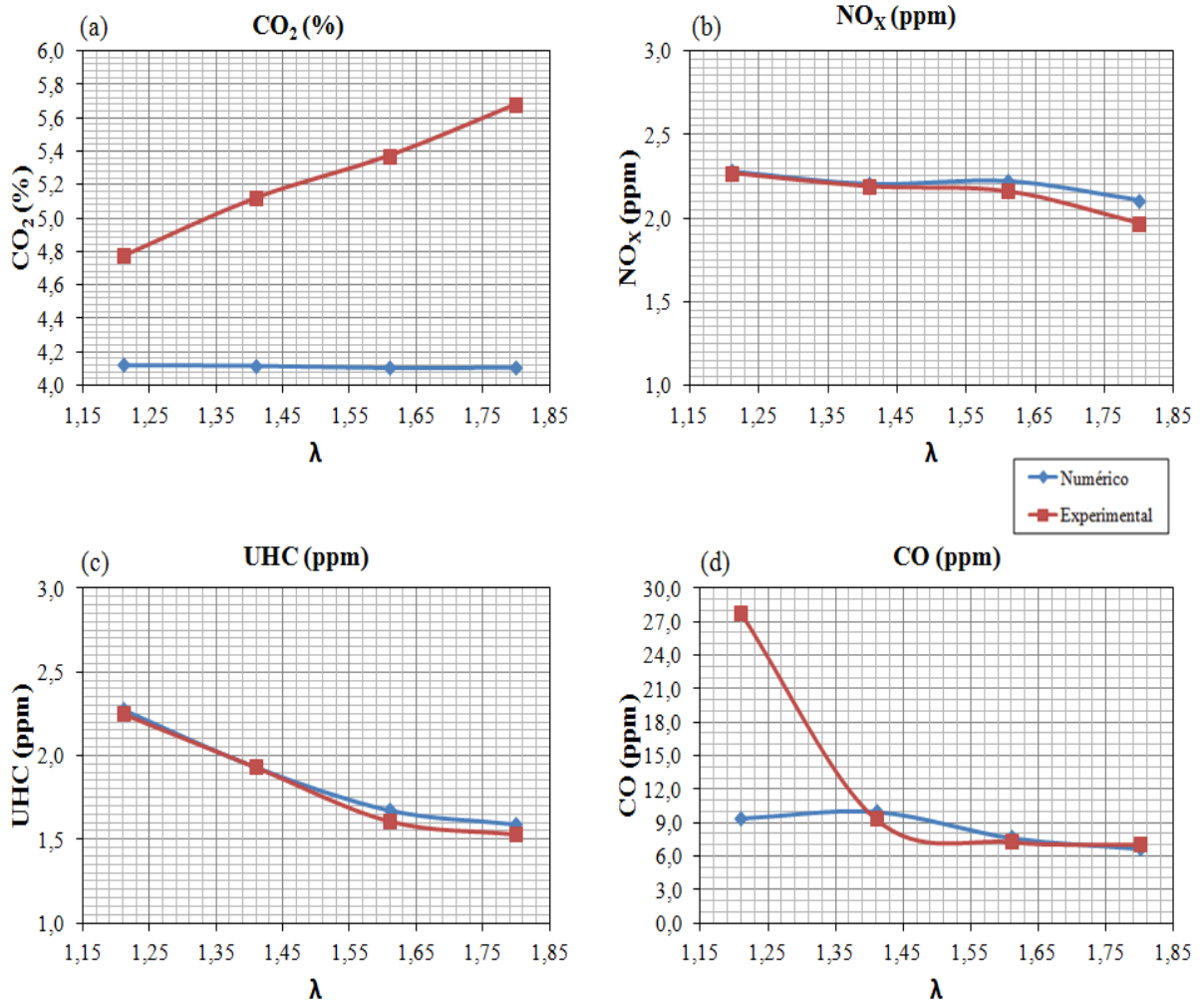


Figura 4.28 - Emissões dos gases de combustão em função do coeficiente de excesso de ar para a câmara operando no regime de combustão sem chama a uma potência de 4 kW.

Capítulo 5

CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo validar a simulação numérica do regime de combustão sem chama aplicada à queima de etanol através da ferramenta numérica ANSYS CFX.

Na primeira parte deste trabalho foram apresentados e discutidos os conceitos sobre o regime de combustão sem chama, obtidos através da revisão bibliográfica tanto para trabalhos experimentais como numéricos. O que se observa nesta discussão é que há muito a ser estudado para atingir uma definição mais concreta para este novo regime de combustão que vem despertando a atenção de pesquisadores dos meios científico e industrial para aplicação em seus processos com as vantagens de reduzir significativamente os níveis de emissão de poluentes como o NO_x e o CO e de aumentar a eficiência nos processos de combustão.

Dos estudos numéricos têm-se que, embora existam vários modelos de turbulência, combustão, radiação e de modelagem de escoamentos de partículas fluidas, conforme observado na literatura para aplicação ao regime de combustão sem chama, os mais indicados para o caso do presente estudo são o modelo de turbulência RNG k- ϵ , de combustão FRC/EDC, de radiação DT e o DPM para o spray de combustível. Para as reações de combustão observou-se que quanto mais detalhado o mecanismo de reação, melhores são os resultados obtidos nas simulações numéricas. Para a modelagem utilizada e o mecanismo de reação de Verma (2004) com 70 reações e 26 espécies, o tempo computacional total gasto foi de 960 horas.

A validação da modelagem numérica foi realizada através da distribuição de temperaturas no interior da câmara de combustão e da composição dos gases de exaustão, observando ainda a influência da variação do coeficiente de excesso de ar no processo.

O comportamento do escoamento reativo para as condições operacionais da câmara a 2 e 4 kW apresentou mesma tendência, conforme observado no Capítulo 4. A modelagem numérica utilizada promoveu baixas temperaturas no interior da câmara que variaram entre 600 e 800°C em todos os testes realizados, enquanto nos experimentos os valores ficaram entre 800 e 1000°C.

Os gradientes de temperatura no interior da câmara para os testes na potência de 2 kW ficaram próximos a 200°C e para a potência de 4 kW os gradientes não ultrapassaram 180°C. Para ambos os casos os resultados numéricos apresentam boa concordância com os valores experimentais de Azevedo (2013).

Na comparação entre os perfis de temperatura em todos os casos analisados, foi observado que, enquanto a distribuição de temperatura numérica se mantém praticamente uniforme ao longo do volume do combustor, a distribuição de temperaturas experimental apresenta picos de temperatura na região central da câmara. Para entender esta diferença de comportamento da distribuição de temperaturas numérica e experimental, deve ser considerada a possibilidade da realização de novos experimentos e simulações numéricas para uma análise mais detalhada dos fenômenos que se desenvolvem na atmosfera de combustão.

A análise da composição dos gases de combustão para as simulações numéricas também apresentou boa concordância com os resultados experimentais. Foram obtidos níveis de emissão de NO_x , CO e UHC muito baixos, notando-se durante as análises que estes níveis caíram significativamente com o aumento de λ para as potências de 2 e 4 kW. Nas emissões de CO_2 observou-se uma constância nos resultados numéricos, enquanto os resultados experimentais aumentaram com o aumento de λ , o que mostra maior eficiência de combustão nas simulações numéricas e a necessidade de novos ensaios experimentais para verificação do perfil de emissão de CO_2 , que teoricamente deveria ser constante, levando em conta que as concentrações foram corrigidas para 15% de O_2 .

Além disso, o aumento de λ influencia positivamente no processo, pois ele aumenta a velocidade de entrada do ar de combustão na câmara e a taxa de recirculação dos gases de combustão. Isto faz com que haja melhor diluição da mistura reagente e de oxigênio e gera uma zona de reação distribuída de forma praticamente uniforme no volume do combustor. Assim a temperatura no processo é baixa, bem como os gradientes de temperatura na câmara, o que evita a formação de pontos quentes na atmosfera de combustão diminuindo, ou até

mesmo inibindo, a formação de poluentes como o NO_x , CO e UHC. Então pode-se afirmar que os resultados numéricos apresentam boa concordância com as características definidas em Wüning & Wüning (1997). Segundo observado nas discussões destes autores, as baixas temperaturas atingidas nos testes numéricos são suficientes para o desenvolvimento do regime de combustão sem chama e podem estar associadas ao tipo de combustível e ao sistema de combustão utilizado.

Com base nos resultados numéricos obtidos no presente estudo foi possível caracterizar o regime de combustão sem chama aplicado à queima de etanol, mostrando a eficiência da ferramenta numérica ANSYS CFX e dos modelos de turbulência, combustão, radiação e do escoamento de partícula fluidas. Os modelos RNG k- ϵ e o FRC/EDC foram eficientes na representação das interações turbulentas e químicas, o que é justificado pelas distribuições de temperatura e a composição dos gases de exaustão. O modelo DT também representou corretamente a transferência de calor no sistema, basta observar a diminuição de temperatura que ocorre na direção radial da câmara de combustão à medida que se aproxima da parede da câmara, característica comum de sistemas que operam no regime de combustão sem chama. Quanto à modelagem do spray de partículas fluidas, pode-se dizer com base na distribuição de velocidades e de temperatura no interior da câmara de combustão que o modelo DPM foi satisfatório e representa com propriedade o spray gerado pelo injetor flow blurry.

A análise realizada no presente trabalho contribui de forma significativa com os meios científico e industrial, pois foi possível caracterizar o regime de combustão sem chama em um sistema que opera com combustíveis líquidos injetados a partir de um injetor flow blurry, cujo spray formado ainda não possuía uma modelagem definida. O sistema completo também não havia sido modelado até o presente momento e a partir dos resultados obtidos foi possível mostrar a potencialidade da ferramenta numérica ANSYS CFX, que possui um interface mais amigável ao usuário, permitindo a realização de análises de forma rápida e eficiente e com um menor esforço computacional quando comparada a outras ferramentas, como por exemplo, o ANSYS FLUENT.

De forma geral, pode-se dizer que a partir do momento em que for possível um completo domínio sobre a tecnologia de combustão sem chama, será possível desenvolver queimadores específicos operando com esta tecnologia para aplicações em novos processos industriais e em substituição aos processos convencionais já existentes, com ganho de eficiência e diminuição dos níveis de emissões de poluentes.

5.1 – Trabalhos Futuros

Temas que podem ser estudados futuramente com base no desenvolvimento realizado no presente trabalho são:

- 1) Alterar a temperatura do ar de combustão para verificar qual o impacto do pré-aquecimento no processo de combustão sem chama e determinar a faixa de pré-aquecimento do ar de combustão.
- 2) Investigar a influência do tamanho de gota no processo de evaporação do combustível e no desenvolvimento do regime de combustão sem chama.
- 3) Desenvolver uma metodologia para análise da formação de NO_x com o intuito de definir qual mecanismo de formação de NO_x tem maior influência quando se trabalha no regime de combustão sem chama.
- 4) Desenvolver simulações numéricas para reprodução do regime de combustão sem chama com a modelagem numérica da presente tese utilizando outros tipos de combustíveis líquidos e também combustíveis sólidos.
- 5) Realizar simulações numéricas para reprodução do regime de combustão sem chama com os modelos de turbulência SSG Reynolds Stress e de combustão FRC/EDC.
- 6) Realizar simulações numéricas para reprodução do regime de combustão sem chama com utilizando a abordagem LES para a modelagem de turbulência.

REFERÊNCIAS

ANSYS INC. **ANSYS FLUENT Theory Guide Release 14.0**, 2011. Canonsburg, PA.

ARGHODE, V. K., GUPTA, A. K. Colorless distributed combustion (CDC): Effect of flowfield configuration. In Proc.47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, 2009.

ARGHODE, V. K., GUPTA, A. K. Effect of flow field for colorless distributed combustion (CDC) for gas turbine combustion. **Applied Energy**, vol. 87, p.1631-1640, 2010.

AYOUB, M., ROTTIER, S., CARPENTIER, S., VILLERMAUX, C., BOUKHALFA, A. M., HONORÉ, D. An experimental study of mild flameless combustion of methane/hydrogen mixtures. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 37, p. 6912-6921, 2012.

AZEVEDO, C. G. **Desenvolvimento de um sistema compacto de combustão sem chama visível utilizando um injetor blurry para queima de biocombustíveis**. Tese de Doutorado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, São Paulo, Brasil, 2013.

BABURIC, M., RAULOT, A., DUIC, N. Implementation of discrete transfer radiation method into swift computational fluid dynamics code. **Thermal Science**, vol. 8, n°.1, p.19-28, 2004.

BEKDEMIR, C.. Numerical modeling of diesel Spray formation and combustion. In Proc. of the 4th European Combustion Meeting, Vienna, Austria, p.1-6, 2008.

BIMBATO, A. M. **Estudo de escoamentos turbulentos em torno de um corpo rombudo de superfície hidraulicamente lisa ou rugosa utilizando o método de vórtices discretos**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, Minas Gerais, Brasil, 2012.

CASTELA, M. L. G. B. **Estudo do regime de combustão sem chama visível numa fornalha laboratorial**. Dissertação de Mestrado, Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal, 2010.

CAVALIERI, A.; JOANNON, M. D. Mild Combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v.30, p.329-366, 2004.

CHEN, Z. B., WEN, J. X., XU, B. P. Large eddy simulation of fire dynamics with the improved eddy dissipation concept. **Fire Safety Science**, v. 10, p. 795–808, 2011.

COELHO, P. J.; PETERS, N. Numerical simulation of a mild combustion burner. **Combustion Flame**, v.3, n.124, p.503-518, 2001.

DERUDI, M., ROTA, R. Experimental study of the mild combustion of liquid hydrocarbons. In **Proc. of the Combustion Institute**, v.33, p.3325–3332, 2011.

DIAS, F. L. G. **Análise do uso de CFD para o regime de combustão sem chama visível em uma fornalha**. Tese de Doutorado, Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, Minas Gerais, Brasil, 2014.

GUPTA, A. K. Flame characteristics and challenges with high temperature air combustion. In International Joint Power Generation Conference, Miami Beach, Florida, USA, 2000.

GUPTA, A. K. **High Temperature Air Combustion: From Energy Conservation Reduction**. CRC Press, New York, 2003.

GUTHEIL, E. **Issues in computational studies of turbulent spray combustion. Experiments and numerical simulations of diluted spray turbulent combustion**, Merci, B., Roekaerts, D. and Sadiki, A. (Eds.), Springer, p. 1-39, 2011.

JAMALI, S. H. **Computational modeling of turbulent ethanol spray flames in a hot diluted coflow**. Master of Science in Mechanical Engineering Thesis, Delft University of Technology, Holanda, 2014.

JENNY, P., ROEKAERTS, D., BEISHUIZEN, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 38(6), p.846–887, 2012.

KATSUKI, M.; HASEGAWA, T. The science and technology of combustion in highly preheated air. **Proc. of the Combustion Institute**, v. 27, p. 3135–3146, 1998.

KHOSHAL, A., RAHIMI, M., ALSAIRAFI, A. A. CFD study on influence of fuel temperature on NO_x emission in a HiTAC furnace. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v.38, p. 1421-1427, 2011.

KUMAR, S., PAUL, P. J., MUKUNDA, H. S. Studies on a new high-intensity low emission burner. **Proc. Combust. Inst.**, v. 29, p. 1131-1137, 2002.

KUMAR, S., PAUL, P. J., MUKUNDA, H. S. Investigations of the scaling criteria for a mild combustion burner. **Proc. Combustion Institute**, v. 30, p. 2613-2621, 2005.

LI, K., ZHOU, L., CHAN, C. K. Large-eddy simulation of ethanol spray-air combustion and its experimental validation. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 22(2), p.214-220, 2014.

MA, L., ZHU, S., RODRIGUES, H., TUMMERS, M., van der MEER, T., ROEKAERTS, D. Numerical investigation of ethanol spray-in-hot-coflow flame using steady flamelet model. In 8th Mediterranean Combustion Symposium. Izmir, Turkey, 2013.

MANCINI, M., WEBER, R. & BOLLETTINI, U. Predicting NO_x emissions of a burner operated in flameless oxidation mode. **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 29, p. 1155–1163, 2002.

MANCINI, M. et al. On mathematical modelling of flameless combustion. **Combustion and Flame**, n. 150, p. 54-59, 2007.

MUNERA, B. A. H., ARRIETA, A. A. A., SIERRA, F. J. C. Numerical models for the phenomenological study of flameless combustion. **Revista Ingeniería e Investigación**, v. 29, n°. 2, p. 70-76, 2009.

MURER, S.; PESENTI, P.; LYBAERT, P. Characterization of flameless combustion of natural gas in a laboratory scale furnace. Proceedings of the European Combustion Meeting. Louvain-la-Neuve, Belgium, 2005.

OBERLACK, M., ARLITT, R., PETERS, N. On stochastic Damköhler number variations in a homogeneous flow reactor. **Combustion Theory Model**, vol. 4, p. 495–509, 2000.

OLIVEIRA, F. L. **Estudo Experimental Sobre Combustão sem Chama Visível com Baixa Temperatura de Pré-Aquecimento de Ar**. Tese de Doutorado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, São Paulo, Brasil, 2012.

ORSINO, S.; WEBER, R.; BOLLETTINI, U. Numerical simulation of combustion of natural gas with high- temperature air. **Combustion Science Technology**, n. 170, p.1-34, 2001.

ÖZDEMIR, I. B.; PETERS, N. Characteristics of the reaction zone in a combustor operating at mild combustion, **Experiments in Fluids**, v.30, p. 683-695, 2001.

PARENTE, A., GALLETI, C., TOGNOTTI, L. Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the MILD combustion in an industrial burner feed with hydrogen enriched fuels. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 33, p. 7553-7564, 2008.

PETERS, N. **Turbulent combustion**. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000.

PLESSING, T., PETERS, N., WÜNNING, J. G. Laser optical investigation of highly preheated combustion with strong exhaust gas recirculation, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 27, pp. 3197-32047, 1998.

REDDY, V. M., SAWANT, D., TRIVEDI, D., KUMAR, S. Studies on a liquid fuel based two stage flameless combustor, **Proceedings of the Combustion Institute**, Vol. 34, pp. 3319–3326, 2013.

ROCHAYA, D. **Numerical simulation of spray combustion using bio-mass derived liquid fuels**. PhD thesis, Cranfield, 2007.

SACOMANO FILHO, F. L. **Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de turbulência k-ε**. Dissertação de mestrado, Escola Politécnica de São Paulo, São Paulo Brasil, 2011.

SILVEIRA NETO, A. **Turbulência nos Fluidos Aplicada**. Apostila. Universidade Federal de Uberlândia, Minas Gerais, Brasil, 1991.

SIRIGANO, A. W. **Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays**. Second edition, Cambridge University Press, New York, USA, 2010.

SZEGÖ, G. G., DALLY, B. B., NATHAN, G. J. Operational characteristics of a parallel jet mild combustion burner system. **Combustion and Flame**, v. 156, n. 2, p.429–438, 2009.

TORRESI, M., CAMPOREALE, S. M., FORTUNATO, B., RANALDO, S., MINCUZZI, M., SAPONARO, M. Diluted combustion in an aerodynamically staged swirled burner fueled by diesel oil, **Processes and Technologies for a Sustainable Energy**, Ischia, 2010.

VERÍSSIMO, A. S. **Estudo experimental de uma câmara de combustão operando no regime de combustão sem chama visível**. Tese de Doutorado, Universidade Técnica de Lisboa. Lisboa, Portugal, 2011.

VERMA, S. S. Low temperature oxidation of ethanol. **Indian Journal of Chemical Technology**, v. 11, p. 410-422, 2004.

WÜNNING, J.A., WÜNNING, J.G. Flameless oxidation to reduce thermal NO formation. **Prog. Energy Combustion Science**, v. 23, p. 81-94, 1997.

WÜNNING, J. A. Flameless combustion and its applications. In: GAS TECHNOLOGY INSTITUTE: NATURAL GAS TECHNOLOGIES. **Proceedings...**, Orlando, USA, 2005.

YANG, W., BLASIAK, W. Mathematical modeling of NO emissions from high-temperature air combustion with nitrous oxide mechanism. **Fuel Processing Technology**, v. 86 (9), p.943–957, 2005.

YAO, J., WEICHENG, F. Theory and numerical study on three dimensional discrete transfer radiation. **Journal of Thermal Science**, vol. 3, n°. 4 p. 263-266, 1994.

ZHU, S., ROERKAERTS, D., MEER, T. Van Der. Numerical simulation of a turbulent methanol spray flame using the Euler-Lagrange method and the steady laminar flamelet model. In Proc. 7th Mediterranean Combustion Symposium, Sardinia, Italy, p. 1–12, 2011.

Anexo A

Mecanismos de Formação de CO e de NO_x

A.1. Monóxido de Carbono (CO)

As emissões de monóxido de carbono resultam do processo de combustão incompleta e são observadas também em condições de combustão rica, com baixo tempo de residência, zonas frias na região de combustão e processos de mistura deficientes.

O processo de oxidação do CO é descrito por Turns (2000) ocorrendo em quatro etapas:



A.2. Mecanismo de Formação de NO_x

A formação de NO_x ocorre na maioria dos processo de combustão e são classificadas através de três mecanismos: Térmico ou de Zeldovich, Prompt ou de Fenimore e via N₂O. Estes mecanismos serão descritos a seguir.

A.2.1 - Mecanismo Térmico ou de Zeldovich

Para explicar a formação do NO Zeldovich propôs o seguinte mecanismo:



Posteriormente foi acrescentada mais uma reação a essas duas:



Este mecanismo proposto constituído das três reações acima citadas é conhecido como o mecanismo prolongado de Zeldovich.

De acordo com o mecanismo de Zeldovich, a taxa de formação de NO é muito mais lenta que a taxa das reações de combustão, sendo que a maioria do NO é formada após as etapas iniciais de combustão. Por isso, a formação de NO térmico pode ser desacoplada do processo de combustão e sua taxa de formação calculada assumindo equilíbrio das reações de combustão (ANSYS INC., 2011).

A.2.2 - Mecanismo NO *prompt* ou de Fenimore

O mecanismo de Fenimore está intimamente ligado à química da combustão de hidrocarbonetos. O esquema geral de do mecanismo Fenimore consiste na reação dos radicais de hidrocarbonetos com o nitrogênio molecular formando aminas ou grupos ciano ($-C\equiv N$). As aminas e os compostos com o grupo ciano são então convertidos para compostos intermediários que finalmente formam NO.

A.2.3 - Mecanismo N_2O

O mecanismo intermediado por N_2O é importante em condições pobres em combustível em baixa temperatura. Este mecanismo é importante nas estratégias de controle de emissão de NO que envolvem combustão pré-misturada pobre.

As três etapas deste mecanismo são:

