

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

TESE DE DOUTORADO

**Simulação Numérica em CFD de uma Câmara de Combustão Ciclônica
para a Queima de Biomassas de Cana-de-açúcar Pulverizadas**

Autor: **Rudy Perez Herrera**

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

Co-Orientador: **Prof. Dr. Marco A. Rosa de Nascimento**

Itajubá, Abril de 2020

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

Rudy Perez Herrera

**Simulação Numérica em CFD de uma Câmara de Combustão Ciclônica
para a Queima de Biomassas de Cana-de-açúcar Pulverizadas**

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

Área de Concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo

Orientador: Prof. Dr. Christian J. Coronado Rodriguez
Co-Orientador: Prof. Dr. Marco A. Rosa de Nascimento

Itajubá, Abril de 2020

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

Rudy Perez Herrera

**Simulação Numérica em CFD de uma Câmara de Combustão Ciclônica
para a Queima de Biomassas de Cana-de-açúcar Pulverizadas**

Tese aprovada por banca examinadora em 23 de abril de 2020,
conferindo ao autor o título de **Doutor em Ciências em
Engenharia Mecânica.**

Banca Examinadora:

Prof. Dr. João Andrade de Carvalho Junior

Prof. Dr. Carlos Manuel Romero Luna

Prof. Dr. Fagner Luís Goulart Dias

Prof. Dr. Juan Jose Garcia Pabon

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

Prof. Dr. Christian Jeremi Coronado Rodriguez (Orientador)

Itajubá, Abril de 2020

“No importa si tu misión en esta vida es insignificante, pero es muy importante que lo hagas”

Gandhi

Dedicatória

À Deus,

“Obrigado Senhor, começamos juntos e terminamos juntos”.

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. Christian Coronado, pela oportunidade e colaboração dada.

Ao Prof. Marco Antônio Rosa do Nascimento, pelo ensino passado e toda a colaboração.

À Ortencia pelo seu amor, apoio e ajuda durante esta etapa.

À Bernardinho pelo seu carinho e a força que me da.

Aos meus pais Javier e Rosa, por todo o apoio e principalmente pelo carinho e amor que sempre me deram.

As minhas irmãs Neyda, Mabel e Arleth, por seu apoio e amizade.

A CAPES, pelo apoio financeiro fornecido durante o período de desenvolvimento deste trabalho.

À Tania e o German pela ajuda com ANSYS FLUENT e seu apoio sempre.

À Raul pelo apoio e amizade.

À Yohan e Haylemar pela amizade e apoio.

A todos os amigos que sempre tiveram uma palavra de apoio durante esta etapa.

Aos professores e funcionários do Instituto de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Itajubá, pela assistência no meu tempo de estudo.

Resumo

PEREZ-HERRERA, R. (2020). *Simulação numérica em CFD de uma câmara de combustão ciclônica para a queima de biomassas de cana-de-açúcar pulverizadas.* Itajubá, 175 p. Tese de Doutorado, Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Os produtos secundários gerados no processamento da cana-de-açúcar, que até poucos anos atrás foram majoritariamente descartados, na atualidade têm-se tornado potenciais recursos energéticos para a geração de energia elétrica. Porém, o aproveitamento desses recursos renováveis disponíveis demanda tecnologias mais eficientes para a transformação desses recursos em energia térmica, e posteriormente em energia elétrica. Com esse objetivo a empresa Brayton Energy projetou uma câmara de combustão ciclônica como um componente fundamental de uma turbina a gás, com queima externa ou ciclo EFGT capaz de gerar 900 kW_e de energia elétrica utilizando como combustível diferentes biomassas pulverizadas. Essa câmara de combustão ciclônica foi estudada neste trabalho através de simulações numéricas computacionais realizadas em ANSYS FLUENT, e utilizando bagaço de cana-de-açúcar pulverizado como combustível para avaliar o projeto da fluidodinâmica e o desempenho da combustão das partículas do bagaço dentro da câmara. As simulações foram realizadas utilizando os modelos de turbulência RMS, RNG $k-\epsilon$, SST $k-\omega$ e *Realizable k- ϵ* . O modelo de transporte de espécies foi utilizado para a combustão e escolheu-se a *FinitRate/Eddy Dissipation* para a iteração das reações químicas com a turbulência. Foi utilizado também o modelo de Fase Discreta (DPM) para o rastreamento das partículas combustíveis e o modelo de Ordenadas Discreta para o modelo de radiação. Os resultados das simulações não reativas da câmara ciclônica mostram os campos de velocidade e as zonas de recirculação dentro da câmara, o que permite avaliar a fluidodinâmica do projeto da câmara. Já os resultados das simulações reativas mostram a distribuição de temperatura e dos produtos da combustão dentro da câmara ciclônica, e fornecem informação de parâmetros de combustão como a temperatura, massa, tempo de residência e porcentagem de queima das partículas de bagaço ao longo das suas trajetórias pela câmara de combustão.

Palavras-chave:

Bagaço e palha de cana-de-açúcar, câmara ciclônica, simulação numérica.

Abstract

PEREZ-HERRERA, R. (2020), *Numerical simulation in CFD of a cyclonic combustion chamber for burning of sugar cane biomass pulverized. Itajubá*, 175p. Institute of Mechanical Engineering, Federal University of Itajubá.

The Secondary products generated in the processing of sugarcane; that until a few years ago were mostly discarded, nowadays they have become potential energy resources for the generation of electric energy. However, the use of these available renewable resources requires more efficient technologies for the transformation into thermal energy, and later into electrical energy. With this objective, the company Brayton Energy designed a cyclonic combustion chamber as a fundamental component of an externally fired gas turbine, or EFGT cycle capable of generating 900 kWe of electric energy using different pulverized biomasses as fuel. This cyclonic combustion chamber was studied in this work through numerical computer simulations performed in ANSYS FLUENT, and using pulverized sugar cane bagasse as fuel, to evaluate the fluid dynamics design and the combustion performance of the bagasse particles inside the chamber. The simulations were performed using the turbulence models RMS, RNG k- ϵ , SST k- ω and *Realizable* k- ϵ . The species transport model was used for the combustion and the Finite Rate/Eddy Dissipation was chosen for the iteration of chemical reactions with turbulence. The Discrete Phase Model (DPM) was also used for the tracking of combustible particles and the Discrete Ordinate model for the radiation model. The results of the non-reactive simulations of the cyclonic chamber show the velocity fields and the recirculation zones inside the chamber, which allows to evaluate the fluid dynamics of the chamber design. In addition, the results of the reactive simulations show the distribution of temperature and combustion products within the cyclonic chamber, and provide information on combustion parameters such as temperature, mass, residence time and percentage of burning of bagasse particles along their trajectories through the combustion chamber.

Keywords

Bagasse and straw of sugar cane, cyclonic chamber, numeric simulation.

Lista de Figuras

Figura 1.1 -	Projeção da produção de bagaço, caldo para etanol e ponta e palha, em milhões de tep.	21
Figura 1.2 -	Ciclo termodinâmico da turbina a gás com queima externa do projeto GETEC-Brayton Energy.	24
Figura 1.3 -	Esboço da câmara de combustão ciclônica projetada para queimar combustíveis sólidos de biomassa.	25
Figura 2.1 -	Tecnologias de conversão de combustíveis sólidos pulverizados (a) combustão de carvão em alto-forno, tecnologia (PCI), (b) combustão em leito fluidizado borbulhante (esquerda), circulante (meio) e leito arrastado (direita), (c) queimador tangencial (esquerda) e queimador <i>swirl</i> (direita). .	32
Figura 2.2 -	Princípio de operação de combustores ciclônicos.	34
Figura 2.3 -	Descrição de zonas de recirculação em escoamentos rotacionais.	38
Figura 2.4-	Visualização instantânea do núcleo de vórtice (esquerda) e núcleos de vórtice em dobre hélice (direita) obtida com técnicas avançadas de LES e POD.	41
Figura 2.5 -	Geometria e resultados do combustor ciclônico estudado por Kops e Malte (2004).	45
Figura 2.6 -	Geometria e resultados da câmara ciclônica estudada por De Souza <i>et al.</i> (2010). .	46
Figura 2.7 -	Malha computacional e resultados da câmara ciclônica estudada por Lima <i>et al.</i> (2017).	47
Figura 2.8-	Geometria e resultados da câmara de combustão ciclônica estudada por Manita Phasomprayoch <i>et al.</i> (2018).	47
Figura 2.9-	Geometria e resultados do combustor <i>swirl</i> usado nos estudos de Warzecha e Boguslawski (2014).	49
Figura 2.10-	Geometria e resultados do combustor ciclônico estudado por Ikram <i>et al.</i> (2009).	50
Figura 2.11-	Geometria do combustor ciclônico e resultados obtidos no estudo de Syred <i>et al.</i> (2004).	51
Figura 2.12-	Câmara ciclônica comercial da Série ONIX.	52
Figura 2.13-	Dimensões em metros da câmara de combustão ciclônica simulada.	54
Figura 2.14-	Geometria do <i>swirler</i>	54
Figura 2.15-	Partes da câmara de combustão ciclônica, (a) Combustor, (b) Vista frontal do combustor e (c) Isolamento da câmara de combustão.. . . .	57
Figura 2.16-	Detalhes importantes da geometria da câmara ciclônica (a) saída do tubo de biomassa com relação ao <i>swirler</i> (b) ângulo de dobrado da aleta e a distância com relação à parte posterior da câmara interna.	58

Figura 3.1 -	Correlações entre α_1 e α_2 segundo diferentes pesquisadores.	72
Figura 3.2 -	Representação dos sub-processos na combustão de partículas solidas e as equações dos modelos escolhidos em ANSYS FLUENT para as simulações da câmara de combustão.. . . .	78
Figura 3.3 -	Predições da distribuição de velocidade axial em um queimador <i>swirl</i> por meio de diferentes modelos de turbulência.. . . .	84
Figura 3.4 -	Modelos escolhidos para as simulações na câmara de combustão ciclônica.	99
Figura 4.1 -	Curvas TG e DTG do bagaço de cana-de-açúcar em atmosfera oxidante	102
Figura 4.2 -	Energia de ativação E_a em função do grau de conversão das partículas (α)	106
Figura 4.3 -	Fator pré-exponencial (log A) em função do grau de conversão da partícula (α).	106
Figura 4.4 -	Distribuição do diâmetro de poros (a) bagaço e (b) <i>char</i> do bagaço de cana-de-açúcar.	109
Figura 4.5 -	Relação ar-combustível (AFR) para o bagaço de cana-de-açúcar, (a) AFR para diferentes condições do bagaço e (b) AFR para diferentes bagaços estudados	117
Figura 4.6 -	Variação da temperatura de chama adiabática para o bagaço de cana-de-açúcar, (a) em função da temperatura do ar na entrada e (b) para diferentes bagaços estudados	118
Figura 4.7 -	Composição dos produtos da combustão do bagaço de cana-de-açúcar, (a) composição teórica e (b) composição para as condições de operação da câmara	118
Figura 4.8 -	Diagrama esquemático da transferência de calor para uma partícula combustível solidas em combustão.	120
Figura 4.9 -	Tempo de secagem das partículas de carvão no estudo de Chen <i>et al.</i> , (2012). (a) secagem durante a moagem e (b) secagem no combustor	122
Figura 4.10-	Tempo de secagem das partículas de bagaço de cana-de-açúcar assumindo 50% de umidade, durante (a) moagem e (b) combustão	123
Figura 4.11-	Tempo de secagem das partículas de bagaço de cana-de-açúcar nas condições de operação da câmara de combustão ciclônica, (a) durante o transporte e (b) dentro o combustor	125
Figura 4.12-	Estimativas do tempo que demora a devolatilização das partículas de bagaço de cana, (a) para três temperaturas de interesse e (b) para baixas temperaturas.	126
Figura 4.13-	Fotografias dos eventos típicos no processo de combustão de uma partícula de bagaço de cana-de-açúcar com ar	128
Figura 5.1 -	Malhas nas superfícies do (a) <i>swirler</i> e (b) combustor	130
Figura 5.2 -	Interior das malhas computacionais (a) <i>swirler</i> e (b) combustor com detalhe do refinamento na região dos <i>holes</i> de resfriamento	131

Figura 5.3 -	Velocidade axial a diferentes distâncias a jusante do <i>swirler</i> para o estudo de independência de malha (a) 0,020 m, (b) 0,050 m, (c) 0,200 m e (d) 0,350 m.	140
Figura 6.1 -	Pontos referencias para curvas de velocidades axial	143
Figura 6.2 -	Curvas da distribuição de velocidade dentro da câmara de combustão (a) velocidade axial, (b) velocidade tangencial	145
Figura 6.3 -	Contornos de velocidade axial. Simulações com o modelo (a) RMS, (b) RNG k- ϵ , (c) SST k- ω , (d) <i>Realizable</i> k- ϵ	148
Figura 6.4 -	Comparação do tamanho das zonas de recirculação previstas pelos diferentes modelos de turbulência, (a) RMS, (b) RNG k- ϵ , (c) SST k- ω e (d) <i>Realizable</i> k- ϵ	152
Figura 6.5 -	Linhas de corrente dentro do combustor coloridos pela magnitude da velocidade tiradas do modelo RMS	154
Figura 6.6 -	Zonas de recirculação dentro do combustor identificadas pelas linhas de corrente tiradas do modelo RMS	154
Figura 6.7 -	Contorno de temperatura para a simulação do modelo RNG k- ϵ , (a) plano de corte frontal, (b) na região da chama e (c) na saída da câmara de combustão	156
Figura 6.8 -	Contornos de temperatura para a simulação do modelo SST k- ω , (a) plano de corte frontal, (b) na região da chama e (c) na saída da câmara de combustão.	158
Figura 6.9 -	Contornos de temperatura para a simulação do modelo <i>Realizable</i> k- ϵ , (a) plano de corte frontal, (b) na região da chama e (c) na saída da câmara de combustão.	159
Figura 6.10 -	Contornos de velocidade axial nas simulações reativas, (a) RNG k- ϵ , (b) SST k- ω , (c) <i>Realizable</i> k- ϵ	161
Figura 6.11 -	Contornos de fração mássica dos voláteis nos modelos simulados (a) RNG k- ϵ , (b) SST k- ω e (c) <i>Realizable</i> k- ϵ	164
Figura 6.12 -	Contornos de taxas de reação das reações heterogêneas nas simulações dos modelos (a) RNG k- ϵ , (b) SST k- ω e (c) <i>Realizable</i> k- ϵ	166
Figura 6.13 -	Trajetória das partículas de bagaço nas simulações com os modelos (a) RNG k- ϵ , (b) SST k- ω , (c) <i>Realizable</i> k- ϵ	168
Figura 6.14 -	Parâmetros de combustão das partículas obtidos com o modelo RNG k- ϵ , (a) temperatura, (b) massa, (c) burnout, (d) tempo de residência.	171
Figura 6.15 -	Parâmetros de combustão das partículas obtidos com o modelo SST k- ω , (a) temperatura, (b) massa, (c) burnout, (d) tempo de residência.	173
Figura 6.16 -	Parâmetros de combustão das partículas obtidos com o modelo <i>Realizable</i> k- ϵ , (a) temperatura, (b) massa, (c) burnout, (d) tempo de residência.	173

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 -	Dados de projeto da câmara de combustão ciclônica para ¼ de escala.	53
Tabela 3.1 -	Escolha do modelo de turbulência segundo o grau de rotação de um escoamento	86
Tabela 3.2 -	Valores das constantes dos modelos de turbulência	89
Tabela 4.1 -	Análise imediata e elementar do bagaço de cana-de-açúcar de diferentes estudos.	104
Tabela 4.2 -	Dados cinéticos para a devolatilização do bagaço de cana-de-açúcar.	108
Tabela 4.3 -	Dados cinéticos configurados nas simulações das câmara de combustão ciclônica..	110
Tabela 4.4 -	Propriedades físicas do bagaço de cana-de-açúcar.	112
Tabela 4.5 -	Valores e correlações para o cálculo de calores específicos utilizados como entradas na solução das equações dos sub-processos na combustão das partículas	114
Tabela 4.6 -	Parâmetros usados na estimação do processo de secagem e aquecimento de partículas de carvão.	122
Tabela 5.1 -	Informações das malhas no estudo de independência de malha	132
Tabela 5.2 -	Condições de fronteira da câmara de combustão configuradas.	134
Tabela 5.3 -	Tempos de simulação nos casos de independência de malha	141
Tabela 6.1 -	Propriedades e parâmetros coletados de partículas para o modelo RNG k-ε	170

Lista de Símbolos

Símbolos Latinos

a_1, a_2, a_3	Constantes da equação do coeficiente de arrasto
a_p	Coefficiente de absorção da partícula
A_k	Fator pré exponencial do composto k, s^{-1}
A, B, C, D	Funções empíricas da esfericidade
A_{in}	Área transversal de entrada, m^2
A_p	Área de superfície da partícula combustível, m^2
Ar	Número de Arquimedes
B_q	Número de transferência de massa
$c_{p,k}$	Calor específico a pressão constante da espécie/substancia k, kJ/kg-K
C_{EBU}	Constante do modelo
C_1, C_2	Constantes do modelo de turbulência RMS
$C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}, C_{\mu}$	Constantes dos modelos de turbulência RNG e Realizable $k - \epsilon$
C_A	Constante no modelo EDM ($C_A = 4$ no ANSYS FLUENT)
C_D	Coefficiente de arrasto
$C_{k,\infty}$	Concentração do vapor de água no meio contínuo, $kmol/m^3$
$C_{k,s}$	Concentração do vapor de água na superfície da partícula, $kmol/m^3$
C_{sw}	Coefficiente de <i>swelling</i>
d_p	Diâmetro da partícula combustível, m
D	Diâmetro, m
D_H	Diâmetro hidráulico, m
$D_{0,r}$	Coefficiente de difusão para a reação r, m^2/s
D_{iff}	Difusividade binária
$D_{ij,t}$	Difusão turbulenta
$D_{ij,v}$	Difusão viscosa
E_a	Energia de ativação, kJ/mol
E_p	Emissão equivalente da partícula
$F_{p,i}$	Forças atuando no centro de massa de cada partícula i, N
g	Aceleração da gravidade (m/s^2)

I	Intensidade turbulenta, %
\widetilde{h}_g	Entalpia sensível da mistura gasosa, kJ/kg
\widetilde{h}_k	Entalpia sensível da espécie gasosa k , kJ/kg
h_{fg}	Entalpia específica de vaporização, kJ/mol
$f_{k,0}$	Fração inicial da componente k (composição imediata) da partícula combustível
g_f	Variância da fração de massa do produto
k_∞	Condutividade térmica do gás (meio contínuo), W/m-K
k_c	Coefficiente de transferência de massa, m/s
k	Energia cinética turbulenta, m^2/s^2
k_i	Constante de taxa na reação i
l_e	Comprimento do redemoinho
L_s	Longitude característica
m	Massa, kg
\dot{m}_k	Vazão mássica da espécie k , kg/s
M_k	Massa molar da espécie k , kg/kmol
m_p	Massa atual da partícula combustível
N	Ordem de reação aparente r
N_k	Fluxo molar do vapor da água, kmol/m ² -s
N_u	Número de Nusselt
p	Pressão do vapor da água no meio contínuo, Pa
\bar{p}	Pressão estática média, Pa
P_{ij}	Produção de turbulência
p_n	Pressão parcial da fase gasosa, Pa
Pr	Número de Prandtl
p_s	Porosidade
p_{sat}	Pressão de saturação, Pa
\dot{q}	Fluxo de calor, kJ/s
\dot{Q}	Calor sensível, W
Q_C	Transferência de calor por convecção, kJ
Q_M	Transferência de calor latente associada à transferência de massa, kJ
Q_R	Transferência de calor por radiação, kJ
Re	Número de Reynolds
Re_d	Número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula combustível

r_p	Raio da partícula, m
\bar{R}	Raio hidráulico, m
$R_{j,r}$	Taxa de reação do <i>char</i> na superfície das partículas por unid. de área, kg/m ² -s
$\bar{R}_{j,r}$	Taxa de depleção do <i>char</i> na superfície das partículas combustíveis, kg/s
$R_{kin,r}$	Taxa cinética da reação r,
R_u	Constante universal dos gases perfeitos, kJ/mol-K
s	Área de superfície de uma esfera, m ²
S	Número swirl
\widetilde{S}_{ch}	Termo fonte de calor devido as espécies químicas
S_m	Termo fonte na equação da continuidade
S_{sph}	Área de superfície real da partícula
St	Número de Stokes
S_{Y_k}	Termo fonte na equação de transporte de espécies
S_{u_j}	Termo fonte da quantidade de movimento
S_h	Termo fonte de calor extra devido à energia
S_r	Termo fonte de calor devido a radiação
t	Tempo, s
VM	Material volátil
X_k	Fração molar da espécie k numa mistura gasosa
Y_j	Fração mássica do <i>char</i> na superfície da partícula combustível
Y_k	Fração mássica da espécie k numa mistura gasosa
T	Temperatura, K
u	Velocidade média temporal, m/s
u'_g	Flutuação de velocidade turbulenta, m/s
v'_i	Coefficiente estequiométrico para [i]
\dot{W}	Potência do ciclo, W

Índices/Subscritos

a	Cinzas
ar	Ar de combustão
ar,t	Ar transportador de combustível

<i>c</i>	<i>Char</i>
<i>daf</i>	Base seca e livre de cinzas
<i>db</i>	Base seca
<i>dw</i>	Madeira seca
<i>e</i>	Elétrica
<i>f</i>	Fluido
<i>g</i>	Gases
<i>k</i>	Espécie/substancia/composto
<i>j</i>	Índice relacionado ao <i>char</i>
<i>l</i>	Líquido
<i>p</i>	Partícula
<i>r</i>	Reação de gaseificação ou combustão do <i>char</i>
<i>s</i>	Sólido
<i>sat</i>	Estado de saturação
<i>th</i>	Térmica
<i>v</i>	Voláteis
<i>vap</i>	Vapor
<i>w</i>	Água/umidade
~	Parte média de uma variável
"	Parte flutuante de uma variável
0	Estado inicial
∞	Meio contínuo (mistura gasosa)

Símbolos Gregos

α	Grau de conversão da partícula
α_1, α_2	Produção volátil da reação 1 e reação 2 na devolatilização
ϵ_{ij}	Dissipação ou transferência de energia cinética à energia térmica
μ_t	Viscosidade turbulenta, Pa-s
σ_k	Número de Prandtl turbulento para a energia cinética
σ_ϵ	Número de Prandtl turbulento para a taxa de dissipação
Φ_{ij}	Redistribuição ou troca de energia entre os componentes
ϵ_p	Emissividade da partícula

η_i	Fator de interpolação
η_r	Fator de eficiência na reação do <i>char</i>
θ_R	Temperatura da radiação, K
ρ_k	Massa específica da substancia k, kg/m ³
σ_p	Fator de espalhamento equivalente da partícula.
τ_2	Tempo de vida do redemoinho
τ_{boil}	Tempo de evaporação, s
τ_p	Tempo de relaxação da partícula, s
\emptyset	Fator de forma
ε	Taxa de dissipação turbulenta, m ² /s ³
η	Eficiência do ciclo
μ	Viscosidade dinâmica, Pa-s
π	Pi = 3,1416
Ω	Ângulo sólido
θ	Ângulo de inclinação da pá do swirler, °
λ	Valor do excesso de ar
σ	Constante de Stefan-Boltzmann (5,67x10 ⁻⁸ W/m ² -K ⁴)
τ	Tempo de resposta, s
$\widetilde{\tau}_{ij}$	Tensor de tensões viscosas, kg/s ² -m
$\overline{\Omega}_{ij}$	Tensor médio da taxa de rotação
$\overline{\rho_g f_1}$	Força de campo, N

Lista de Abreviaturas e Siglas

AFR	Relação ar-combustível
CCDM	<i>Contínuos Combined Discrete Model</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DEM	<i>Discrete Elements Method</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DO	Ordenadas discretas
DPM	Modelo de fase discreta
DSC	Calorimetria Diferencial por Scanner
DTA	Análise Térmica Diferencial

DTG	Termogravimetría Derivada
EFGT	<i>Externally Fired Gas Turbine</i>
GD	Geração Distribuída
LES	<i>Large eddy simulation</i>
MUCSL	<i>Monotone Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws</i>
OFW	<i>Ozawa Flinn Wall Method</i>
PCI	<i>Injection Coal Pulverized</i>
PCS	Poder Calorífico Superior
PISO	<i>Pressure Implicit with Splitting of Operators</i>
POD	<i>Proper Orthogonal Decomposition</i>
PVC	<i>Precession Vortex Core</i>
QUICK	<i>Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics</i>
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier-Stokes equation</i>
RMS	<i>Reynolds Stress Model</i>
RNG	<i>Renormalized Group</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
TG	Termogravimetría
UDFs	<i>Users Defined Functions</i>
UPWIND	<i>Upwind-Difference</i>
URF	<i>Under-Relaxation Factor</i>
VM	Material volátil
WSGG	<i>weighted-sum-gray-gases</i>
XDEM	<i>Extended Discrete Elements Model</i>

Sumário

1. INTRODUÇÃO	20
1.1. Objetivos do presente trabalho	27
1.2. Justificativas e relevância do trabalho	27
1.3. Estrutura da tese	28
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E A CÂMARA DE COMBUSTÃO EM ESTUDO	30
2.1. Introdução	30
2.2. Funcionamento das câmaras de combustão ciclônicas.	34
2.3. Características dos combustores ciclônicos.	36
2.3.1. Formação de zonas de recirculação.	37
2.3.2. Tamanho da zona de recirculação	41
2.3.3. Efeitos da geometria do combustor	42
2.3.4. Benefícios das zonas de recirculação	43
2.4. Revisão bibliográfica de estudos com câmaras de combustão ciclônicas usando simulação numérica computacional.	45
2.5. Descrição da câmara de combustão em estudo	53
2.5.1. <i>Swirler</i>	54
2.5.2. Alimentação de biomassa	55
2.5.3. Combustor e zona de reação	56
2.5.4. Parede externa	58
2.5.5. Revestimento externo	59
3. COMBUSTÃO DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS PARTICULADOS COM CFD	60
3.1. Considerações iniciais	60
3.2. Escoamentos gás-partículas.	63
3.2.1. Carregamento de partículas e número de Stokes	63
3.2.2. Regime de fluidização.	65
3.2.3. Modelos multifásicos para escoamentos gás-partícula	66
3.3. Modelagem da conversão termoquímica das partículas de biomassa e da fluidodinâmica do combustor	67
3.3.1. Modelagem da conversão termoquímica das partículas combustíveis	67
3.3.1.1. Secagem	68
3.3.1.2. Devolatilização	70

3.3.1.3.	Combustão do <i>char</i>	75
3.3.1.4.	Reações homogêneas	76
3.3.2.	Modelagem fluidodinâmica da câmara de combustão ciclônica.	79
3.3.2.1.	Modelagem da turbulência em escoamentos rotacionais com CFD	80
3.3.2.2.	Escolha dos modelos de turbulência para escoamentos rotacionais	84
3.3.3.	Movimento das partículas	95
3.3.3.1.	Modelagem de partículas não-esféricas	96
3.3.4.	Transferência de calor entre gás-partícula	97
3.3.4.1.	Modelo de radiação por Ordenadas Discreta	98
4.	CINÉTICA QUÍMICA E PROPRIEDADES FÍSICAS DO BAGAÇO DE CANA- DE-AÇUCAR.	100
4.1.	Introdução	100
4.2.	Parâmetros cinéticos para o bagaço de cana-de-açucar	103
4.2.1.	Cinética da combustão do <i>char</i> do bagaço	108
4.3.	Propriedades físicas das partículas de bagaço de cana-de-açucar	111
4.4.	Parâmetros básicos da combustão do bagaço de cana-de-açucar	113
5.	SIMULAÇÃO DA CÂMARA DE COMBUSTÃO CICLÔNICA	129
5.1.	Malha computacional da câmara de combustão.	129
5.2.	Condições de contorno para as simulações	132
5.2.1.	Entradas	132
5.2.2.	Saída	133
5.2.3.	Paredes	133
5.2.4.	Condições de contorno para as partículas	134
5.3.	Esquemas numéricos de solução	135
5.4.	Procedimento de solução	138
5.5.	Resultados da independência de malha	139
6.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	142
6.1.	Resultados não-reativos	142
6.2.	Resultados reativos	155
7.	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	175
7.1.	Recomendações para trabalhos futuros.	177
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	178

ANEXO A188
ANEXO B.191

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A participação de biomassas na produção e comercialização de energia elétrica (bioeletricidade) vem aumentando nos últimos anos na matriz energética brasileira. Em média, desde 2016, esta participação representa 8,9 % do total da matriz, dos quais 76,8 % são provenientes do bagaço da cana-de-açúcar (EPE, 2018). A energia termelétrica produzida a partir de biomassas de cana-de-açúcar, é uma alternativa sustentável ao abastecimento e a segurança energética do Brasil, pois na matriz energética brasileira, embasada na oferta hídrica, a energia proveniente dessa biomassa mostra-se estratégica pela sua complementariedade com a fonte hídrica, uma vez que os períodos tipicamente mais secos são também os de maior produção canavieira (abril a novembro) (NACHILUK e RAMOS, 2017).

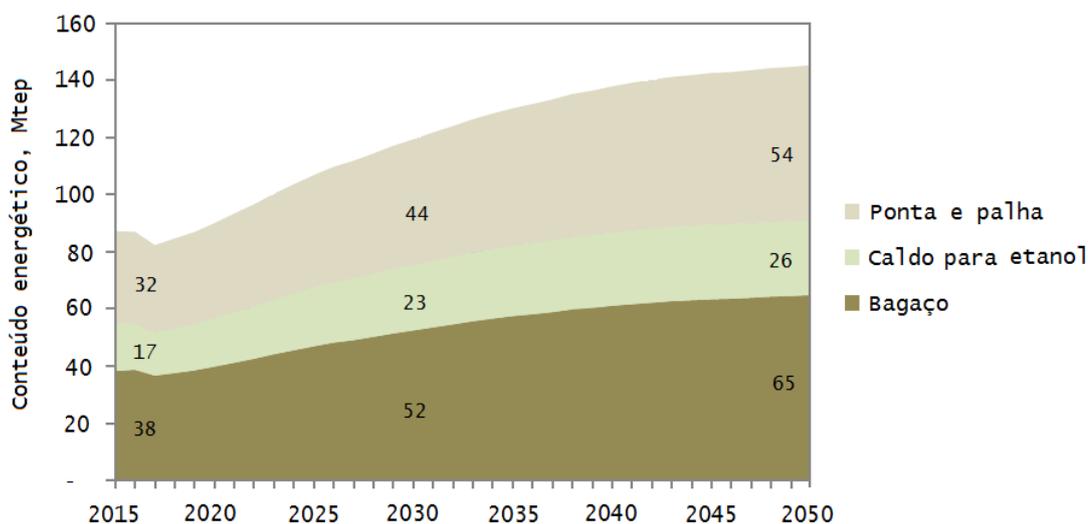
Adicionalmente, os produtos secundários (pontas e palha) gerados no processamento da cana-de-açúcar, que até poucas décadas atrás foram majoritariamente descartados, na atualidade têm-se tornado potenciais matérias-primas para a cogeração de energia e produção de etanol de segunda geração (De CAMPOS e CAIXETA, 2017).

No que diz respeito à disponibilidade das biomassas da cana-de-açúcar para geração de energia, dados da CONAB (2019) relacionados à produção de cana, bagaço e palha na safra do ano 2017/18 indicam uma produção de 620,43 milhões de toneladas de cana, uma produção estimada de 155,10 milhões de toneladas de bagaço e 86,86 milhões de toneladas de palha em base úmida e sem tratamento, utilizando-se como referência 250 kg de bagaço e 140 kg de palha por tonelada de cana produzida (TORQUATO e RAMOS, 2013). Para a safra do 2018/2019 é prevista uma produção de cana-de-açúcar equivalente a 622,27 milhões de toneladas (CONAB, 2019).

De acordo com o presidente da empresa Cosan Biomassa, Mark Lyra (2016), a energia presente na biomassa de cana que se deixa de aproveitar todo ano é cerca de 80 milhões de toneladas de *pellets*, quantidade energética que equivale a aproximadamente 30% da produção total da Petrobrás. Portanto, existe uma quantidade de energia muito relevante para ser aproveitada, e para criar um mercado em torno disso. Atualmente, tenta-se criar um novo *commodity* para servir a economia de baixo carbono, mas precisa-se de um planejamento de longo prazo, com uma garantia de preços para disputar investimentos e infraestrutura para captar essa energia.

No que diz respeito às projeções da produção de bagaço e palha de cana, segundo a Nota Técnica “Potencial dos Recursos Energéticos no Horizonte 2050” (2018) elaborada pelo Ministério de Minas e Energia (MMA) e a Empresa de Pesquisas Energéticas (EPE), a produção de cana-de-açúcar deve crescer 55% com relação à produção atual até 2050, chegando a pouco mais de 1 bilhão de toneladas. Em 2024 espera-se um fator de geração de 270 kg de bagaço e 155 kg de palha e pontas por tonelada de cana. Isto, após a entrada de variedades de cana-energia que levam a um aumento destes fatores. A Figura 1.1 mostra esta projeção do aumento da produção de bagaço e seu conteúdo energético equivalentes ao do petróleo até 2050.

Figura 1.1- Projeção da produção de bagaço, caldo para etanol e ponta e palha, em milhões de tep.



Fonte: Adaptado de Potencial dos Recursos Energéticos no Horizonte 2050 (2018).

A Figura 1.1 mostra que em 2015 a produção energética baseado no bagaço mais as pontas e palha de cana foi de 70 milhões de tep. Em 2050, esse valor será de 119 milhões de tep, o que representa um crescimento de 70%.

Desta forma, observa-se que existe uma quantidade de energia nos resíduos do processamento da cana-de-açúcar para ser aproveitada na geração de energia térmica e elétrica. Porém, deve-se entender que a utilização destes recursos devem ser realizados com responsabilidade ambiental, e as tecnologias utilizadas devem combinar elevadas eficiências de conversão com baixas emissões de materiais particulados e de gases de efeito estufa (DURANTE *et al.* 2017).

Por outro lado, com relação às tecnologias de conversão de biomassa em energia térmica, o bagaço de cana e outros resíduos de biomassa lignocelulósica têm sido convertidos em energia térmica, utilizando dispositivos de queima direta como as caldeiras de grelha para a produção de vapor de água; os gaseificadores para a produção de gás de síntese; as câmaras de combustão para produção de gases quentes de exaustão e os reatores químicos para a produção de combustíveis líquidos, entre outros. A utilização de caldeiras de grelha para a queima de bagaço de cana-de-açúcar é uma tecnologia sólida e bem estabelecida na indústria de geração termelétrica no setor sucroalcooleiro, de papel e celulose (CENTENO, 2015; TROCCIA, 2013).

A utilização de bagaço de cana-de-açúcar em gaseificadores para a geração de energia térmica foi bastante estudada em anos recentes (GOMEZ *et al.* 1999; DINIZ FILHO *et al.* 2013; STANMORE, 2010; SAFARI *et al.* 2016), mas esta tecnologia apresenta algumas limitações que a tornam pouco eficiente e a posicionam como um dispositivo de difícil operação e manutenção, principalmente devido à heterogeneidade da biomassa, o que provoca formações de aglomerados dentro dos gaseificadores, o que causa danos ao dispositivo e provoca paradas não programadas do equipamento (TRAVERSO *et al.* 2006; AL-ATTAB e SAINAL, 2015).

Existem também os reatores de leito fluidizado borbulhante (BFB) e leito fluidizado circulante (CBF), que são opções interessantes para a combustão do bagaço de cana e outros combustíveis sólidos, segundo o relato de alguns pesquisadores (KUPRIANOV *et al.* 2005; MESA-PÉREZ *et al.* 2013). A característica comum dos dispositivos de leito fluidizado é o fato das partículas combustíveis serem transportadas por um fluido, já os fenômenos de transferência de massa e calor são realizados no estado fluidizado quando as partículas estão em suspensão (TOPOROV, 2014).

Alternativamente, as câmaras de combustão ciclônicas oferecem uma boa solução para os requerimentos de combustão de partículas sólidas. Segundo Gupta *et al.* (1984),

devido as regiões de alta mistura, produtos das zonas de recirculação desenvolvidas pelo escoamento conseguem-se boas características de combustão e amplos limites de estabilidade da chama, além de que os tempos de residência das partículas dentro do combustor serem maiores, devido ao escoamento padrão do tipo envolvente do gás que arrasta as partículas e faz com que elas circulem por maior tempo dentro da câmara de combustão (KILIK, 1976; SLOAN *et al.* 1986). Portanto, os combustores ciclônicos são adequados para a queima de carvões de baixa qualidade e combustíveis de biomassa.

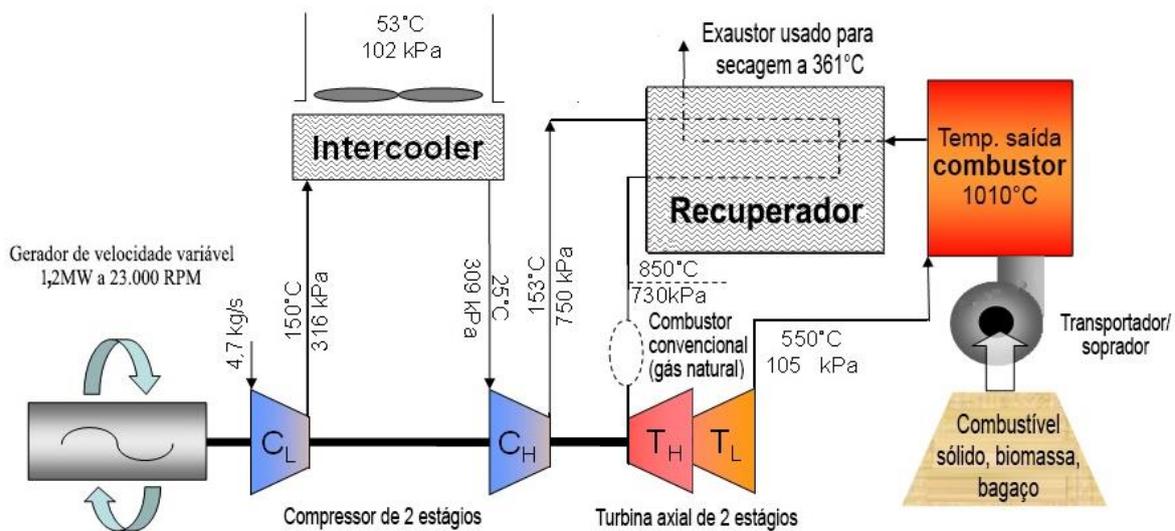
Além dos dispositivos geradores de energia térmica citados, existem dispositivos de engenharia que convertem a energia térmica gerada em energia elétrica no mesmo ciclo de potência. A turbina a gás com queima externa ou ciclos EFGT (*Externally Fired Gas Turbine*) é um exemplo. Em ciclos EFGT que trabalham com biomassa como combustível, o ar comprimido é aquecido no trocador de calor de alta temperatura, usando os gases quentes produzidos pelo processo de combustão da biomassa na câmara externa acoplada. O ar quente se expande na turbina e depois alimenta a câmara de combustão (AL-ATTAB e SAINAL, 2015; TRAVERSO *et al.* 2006; SARAVANAMUTTOO *et al.* 2008; KAUTZ e HANSEN, 2007). O calor residual de exaustão é recuperado, podendo-se utilizar para a secagem da biomassa bruta em um secador ou para a produção de água quente em um trocador de calor de baixa temperatura. A Figura 1.2 mostra a configuração de um ciclo EFGT com *intercooler* e permite observar o funcionamento deste tipo de dispositivo.

Porém, independentemente do dispositivo que se utilize, uma dificuldade que ainda persiste e tornou-se uma barreira para a utilização de combustíveis sólidos de biomassa, é a complexidade e difícil entendimento dos processos de conversão termoquímicos. Além disso, a falta de dados de cinética química de combustíveis de biomassa em condições próximas ou iguais aos processos reais de operação (altas temperaturas e elevadas taxas de aquecimento) tem dificultado o desenvolvimento de dispositivos de engenharia para a utilização da biomassas na geração de energia térmica, e posteriormente em energia elétrica. Portanto, é relevante realizar estudos de dispositivos transformadores de energia para estes tipos de combustíveis disponíveis no território brasileiro.

Logo, neste trabalho utilizam-se estes conceitos para investigar a utilização de bagaço de cana pulverizado como combustível de uma câmara de combustão ciclônica de um ciclo EFGT. Inicialmente, com o propósito de aproveitar as biomassas disponíveis em território brasileiro para gerar energia elétrica, em 2014 a empresa Brayton Energy (uma

empresa de P&D dos Estados Unidos especializada em projetos, protótipos e testes de turbo máquinas e componentes de sistemas de turbinas a gás) em parceria com o Grupo de Estudos em Tecnologias de Conversão de Energia (GETEC) da Universidade Federal de Itajubá-UNIFEI, tentaram desenvolver um novo ciclo de potência de turbina a gás movido a biomassa de 900 kW de potência elétrica para o mercado de geração distribuída (GD) brasileiro. Segundo o documento “Turbina a gás de biomassa-Fase I: Teste de componente crítico. Estudos econômicos, planejamento e projeto” elaborado pela GETEC e Brayton Energy em 2014, a unidade funcionária com combustíveis renováveis possui diversos tipos de resíduos sólidos de biomassa, onde inicialmente seria estudado o bagaço de cana-de-açúcar, um recurso abundante no Brasil como fonte primária de combustível. A Figura 1.2 mostra a configuração do ciclo EFTG proposto e apresenta dados das propriedades termodinâmicas em diferentes pontos do ciclo definindo o estado do fluido de trabalho (ar) em cada um deles.

Figura 1.2- Ciclo termodinâmico da turbina a gás com queima externa do projeto Brayton Energy-GETEC.



Fonte: Brayton Energy (2014).

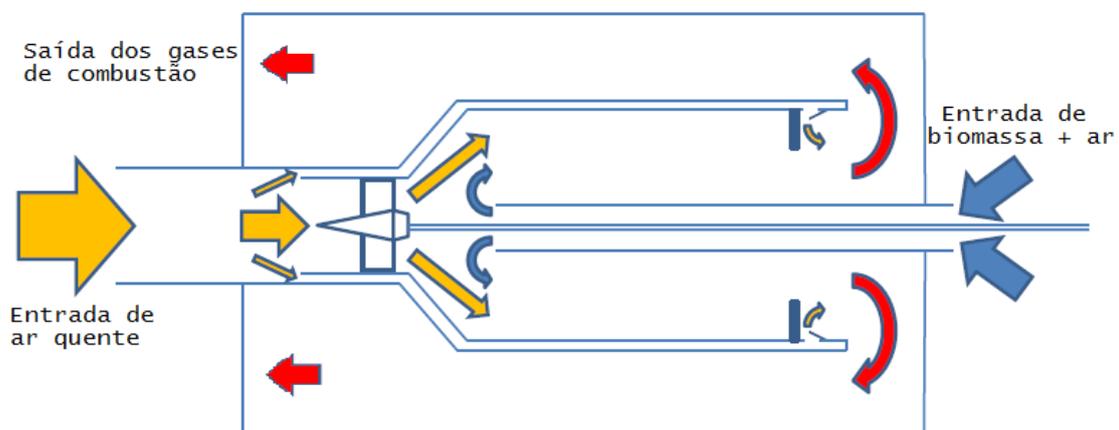
Deste projeto proposto, a fase inicial pretendia realizar estudos do recuperador de calor e da câmara de combustão. Os estudos estariam associados à transferência de calor derivado da biomassa à uma turbina a gás que opera com temperatura de projeto de 850 °C. Portanto, o desafio era cumprir esta especificação com um sistema recuperador-câmara de combustão compactos e integrados. Segundo o ciclo da Figura. 1.2, pelo fato da câmara de combustão de pressão atmosférica receber ar fresco em elevada temperatura (aproximadamente 550 °C) do escape da turbina, a biomassa deveria ser queimada

completamente, com baixo índice de hidrocarbonetos UHC não queimados e baixas emissões de NO_x (BRAYTON ENERGY e GETEC, 2014). E o recuperador de alta temperatura teria o papel de fornecer calor ao ar pressurizado para alcançar os 850°C quando entrasse na turbina.

Sendo assim, um recuperador compacto fabricado com uma liga de qualidade e formado de alumina foi desenvolvido para esta tarefa extrema. A Brayton Energy possui duas patentes do recuperador. Por sua vez, a câmara de combustão para a queima de biomassas foi projetado pela Brayton Energy, onde eles possuem um modelo em escala reduzida ($1/4$ de escala da câmara real), mas não existem estudos complementares dessa câmara que certifiquem o projeto e funcionamento dela. Um esboço da câmara é mostrado na Figura 1.3 que mostra o sentido do escoamento do ar, do combustível e dos gases de escape, indicando que se trata de uma câmara de combustão ciclônica horizontal contracorrente, no que se refere à alimentação do combustível.

Desta forma, pretende-se realizar estudos complementares através de simulações numéricas computacionais da câmara de combustão ciclônica, para avaliar o seu projeto e funcionamento como um componente do ciclo EFGT, projetado pela Brayton Energy-GETEC. Os estudos da câmara ciclônica da Figura 1.3 serão realizados no modelo de escala reduzida que a Brayton Energy possui, portanto, a câmara de combustão em estudo deve gerar energia térmica necessária para gerar 225 kWe no ciclo EFGT mostrado na Figura 1.2, que foi projetado para gerar 900 kWe em escala real.

Figura 1.3- Esboço da câmara de combustão ciclônica projetada para queimar combustíveis sólidos de biomassa.



Fonte: Brayton Energy (2014).

Deve-se salientar que o estudo a $\frac{1}{4}$ de escala do tamanho real da câmara foi planejado pela Brayton Energy para realizar os estudos iniciais, portanto, eles realizaram o modelo da câmara de combustão com as dimensões correspondente a esta escala. As dimensões da câmara ciclônica são mostradas na Figura 2.13. Embora os estudos iniciais serem realizados em um modelo à escala, os resultados e variáveis de interesse obtidos neste estudo podem ser transformados a escala real utilizando, por exemplo, a Lei de Semelhanças da Mecânica dos Fluidos, que considera as semelhanças geométricas, semelhanças cinemáticas e semelhanças dinâmicas. Além disso, métodos de escala têm sido usados com sucesso em aplicações de engenharia para transferir as propriedades de equipamentos menores para equipamentos maiores. Em princípio, expressões matemáticas podem ser formuladas para serem geralmente válidas; no entanto, pode ser difícil resolvê-los mesmo com os meios computacionais atuais. Um passo para a simplificação é converter as expressões matemáticas que descrevem os processos em formas adimensionais derivando assim números adimensionais que contêm os parâmetros principais a serem escalados (BOLHÀR-NORDENKAMPF, 2016).

Adicionalmente, as abordagens utilizadas para a transformação de escala em leitos fluidizados por Glicksman (1984) e Werther (1980) podem ser uma guia para utilizar os resultados obtidos em uma planta em escala de laboratório (modelo) e transferi-los para a escala industrial (real) através de grupos adimensionais. Em aplicações onde às semelhanças fluidodinâmicas são de grande importância, como no caso dos ciclones, o problema frequentemente envolve a transferência de informações de um modelo a frio de pequena escala para um modelo real operado sob condições quentes de 800 °C ou acima (MORIN *et al.* 2001). Nesse caso, várias abordagens de escalonamento precisam ser investigadas simultaneamente para fornecer um resultado ótimo, sendo o escalonamento de dinâmica dos fluidos o principal e que normalmente é realizado em um modelo de escoamento a frio. As reações químicas são, entretanto, também determinadas pelo tamanho do equipamento utilizado. Por exemplo, se a química é estudada em uma unidade em escala de laboratório, os pesquisadores devem garantir que as condições e equipamentos usados correspondam aos usados no processo industrial. Normalmente, não é possível estudar todos os aspectos simultaneamente em um único reator de laboratório, embora reações químicas possam ser estudadas desde que o conceito de similaridade química seja atendido (BOLHÀR-NORDENKAMPF, 2016).

1.1 Objetivos do presente trabalho

O objetivo geral é estudar a fluidodinâmica e o processo de combustão de partículas de bagaço de cana-de-açúcar em uma nova câmara de combustão ciclônica, através de simulações numéricas CFD em ANSYS FLUENT. A câmara de combustão a ser estudada (ver Figura 1.3) é um componente de um ciclo de turbina a gás com queima externa ou ciclo EFGT.

Os objetivos específicos são:

- Realizar uma análise detalhada das características fluidodinâmicas da câmara de combustão.
- Adotar um modelo numérico adequado para o tipo de combustor e para o tipo de combustível que está sendo estudado.
- Selecionar alguns trabalhos experimentais que forneçam os dados de cinética química do bagaço de cana-de-açúcar necessários para realizar as simulações na câmara de combustão.

1.2 Justificativas e relevância do trabalho

Este trabalho promove investigações de dois temas que são relevantes para o futuro da utilização de combustíveis sólidos na geração de energia térmica e elétrica. Por uma parte, devido ao seu adequado projeto e boas características de combustão, os combustores ciclônicos mostram-se apropriados na utilização de combustíveis de biomassa particulados. Por outro lado, devido à grande disponibilidade de fontes de biomassa no território brasileiro, é necessário novas tecnologias para seu aproveitamento na área de geração de energia.

O projeto da câmara ciclônica em estudo busca aproveitar o máximo possível da energia liberada na queima de combustíveis de biomassa pulverizada. O fato das partículas de biomassa entrar em direção oposta ao escoamento dos gases produtos da combustão, permite ao combustível frio e úmido aquecer e secar enquanto avançam com direção à zona de reação. Também, o *swirler* de palhetas curvas gera elevada turbulência ao ar que vem da turbina, o que permitirá uma alta mistura entre as partículas de combustível e o ar, resultando em maiores taxas de troca de massa e energia e melhorando assim a combustão. Além disso, os tempos maiores de residência e os fenômenos particulares provocados pelo escoamento

característico dos combustores ciclônicos, teoricamente tornam esta câmara de combustão como uma potencial alternativa para a queima de combustíveis de baixo poder calorífico.

Portanto, é relevante e necessário realizar investigações desta nova câmara de combustão ciclônica, com flexibilidade para queimar biomassas provenientes da agroindústria, florestas e resíduos sólidos urbanos.

Sendo assim, para o estudo da câmara ciclônica precisa-se entender adequadamente os sub-processos que acontecem na combustão de biomassas particuladas, como a secagem, pirólise ou devolatilização, reações homogêneas e heterogêneas do *char*, e ainda incluir modelo de seguimento de partículas para obter informações delas em diferentes pontos estratégicos de interesse dentro da câmara, ou incorporar modelos de acoplamento entre partículas e fluido, o que nem sempre é fácil de conseguir e adiciona um desafio maior aos estudos. Portanto, a simulação numérica da câmara ciclônica utilizando modelos adequados, apresenta-se como uma ferramenta útil que pode entregar resultados valiosos para entender o funcionamento do projeto desta câmara, e a conversão termoquímica de um combustível abundante no Brasil como é o bagaço de cana-de-açúcar.

Deve-se salientar que a câmara de combustão do ciclo EFGT não tinha desenhos CAD, portanto neste estudo realizou-se modelos CAD em 3D e planos a partir de esboços e traços da geometria da câmara.

1.3 Estrutura da tese

Além deste primeiro capítulo, onde é apresentada a introdução, assim como os objetivos e a relevância do trabalho, esta tese possui outros 6 capítulos:

O Capítulo 2 está dedicado ao estudo de câmaras de combustão ciclônica. Explica-se inicialmente nas primeiras subseções deste capítulo alguns dos aspectos relacionados ao funcionamento e ao escoamento ciclônico característico deste tipo de combustores. Posteriormente, são revisados aspectos relacionados às zonas de recirculação, sua formação, benefícios e seu impacto no desempenho dos combustores ciclônicos. Também apresenta-se neste capítulo uma revisão bibliográfica de estudos por simulação numérica computacional de combustores ciclônicos encontrados na literatura. Na parte final do capítulo descreve-se em detalhe a câmara ciclônica em estudo, explicando cada uma das partes que compõem a câmara.

No Capítulo 3 aborda-se a combustão de combustíveis sólidos particulados com CFD. Inicialmente, estuda-se os conceitos de combustão de biomassa e as abordagens frequentemente utilizadas no seu estudo. A seguir, descreve-se os sub-processos envolvidos na conversão termoquímica das partículas combustíveis, definindo para cada sub-processo o modelo escolhido para sua modelagem computacional. Posteriormente, é descrito o modelo numérico para o estudo da fluidodinâmica da câmara ciclônica, onde são abordados em detalhes os modelos de turbulência escolhidos para representar o escoamento turbulento.

No Capítulo 4, com o propósito de encontrar na literatura dados da cinética química do bagaço de cana-de-açúcar, são estudados trabalhos experimentais realizados com cana brasileira e os métodos para a determinação dos dados cinéticos. De igual forma, estuda-se trabalhos da literatura que determinaram experimentalmente propriedades físicas do bagaço de cana, que são necessários para definir as configurações de materiais no software comercial ANSYS FLUENT. Na parte final deste capítulo são realizados cálculos de parâmetros de combustão básicos do bagaço de cana-de-açúcar nas condições de operação da câmara de combustão.

No Capítulo 5 há a explicação dos passos seguidos na elaboração da geometria, a malha computacional e as configurações das condições de contorno para as simulações do bio-combustor em estudo utilizando ANSYS FLUENT. É explicado a fase de independência de malha, onde são descritos os diferentes métodos de discretização escolhidos para a simulações. Na parte final, analisa-se as estratégias de solução para a realização das simulações da fluidodinâmica e com reações de combustão.

São apresentados no Capítulo 6 os principais resultados obtidos nas simulações, e são comentados extensamente. Além disso, é discutido as limitações e dificuldades encontradas nas simulações.

Finalmente, no Capítulo 7 são apontadas as conclusões desta tese e também as sugestões de trabalhos futuros. A estrutura deste trabalho é finalizada com as referências bibliográficas e os Apêndices A e B.

Capítulo 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E A CÂMARA DE COMBUSTÃO EM ESTUDO

Alguns combustíveis, tal como carvões de baixa qualidade, biomassas lignocelulósicas, resíduos de processos industriais, resíduos sólidos urbanos, entre outros, possuem baixo poder calorífico e elevadas energias de ativação. Logo, o principal requerimento para a combustão desses combustíveis é um elevado grau de mistura para garantir que o combustível seja continuamente cercado por um suprimento de oxigênio fresco, e acoplado a uma boa retenção e reciclagem do calor gerado na combustão para o processo de ignição (SYRED *et al.* 2004). Além disso, quando trata-se de combustíveis com elevada quantidade de umidade, elevado teor de cinzas, baixa reatividade, como é o caso das biomassas, precisam-se de tempos de residência maiores (TOPOROV, 2014). No caso específico do carvão e biomassas lignocelulósicas, uma característica importante na combustão desses combustíveis, quando se encontram em estado particulado, é o fato da combustão ser mais eficiente quando estas partículas estão em suspensão (DE SOUZA *et al.* 2010). Portanto, se o objetivo é a queima de biomassa pulverizada, deve-se escolher uma tecnologia de combustão que minimamente reúna todos os requerimentos mencionados acima. Para isto, realiza-se brevemente nos parágrafos seguintes uma análise de algumas das tecnologias existentes para a queima de partículas combustíveis sólidas.

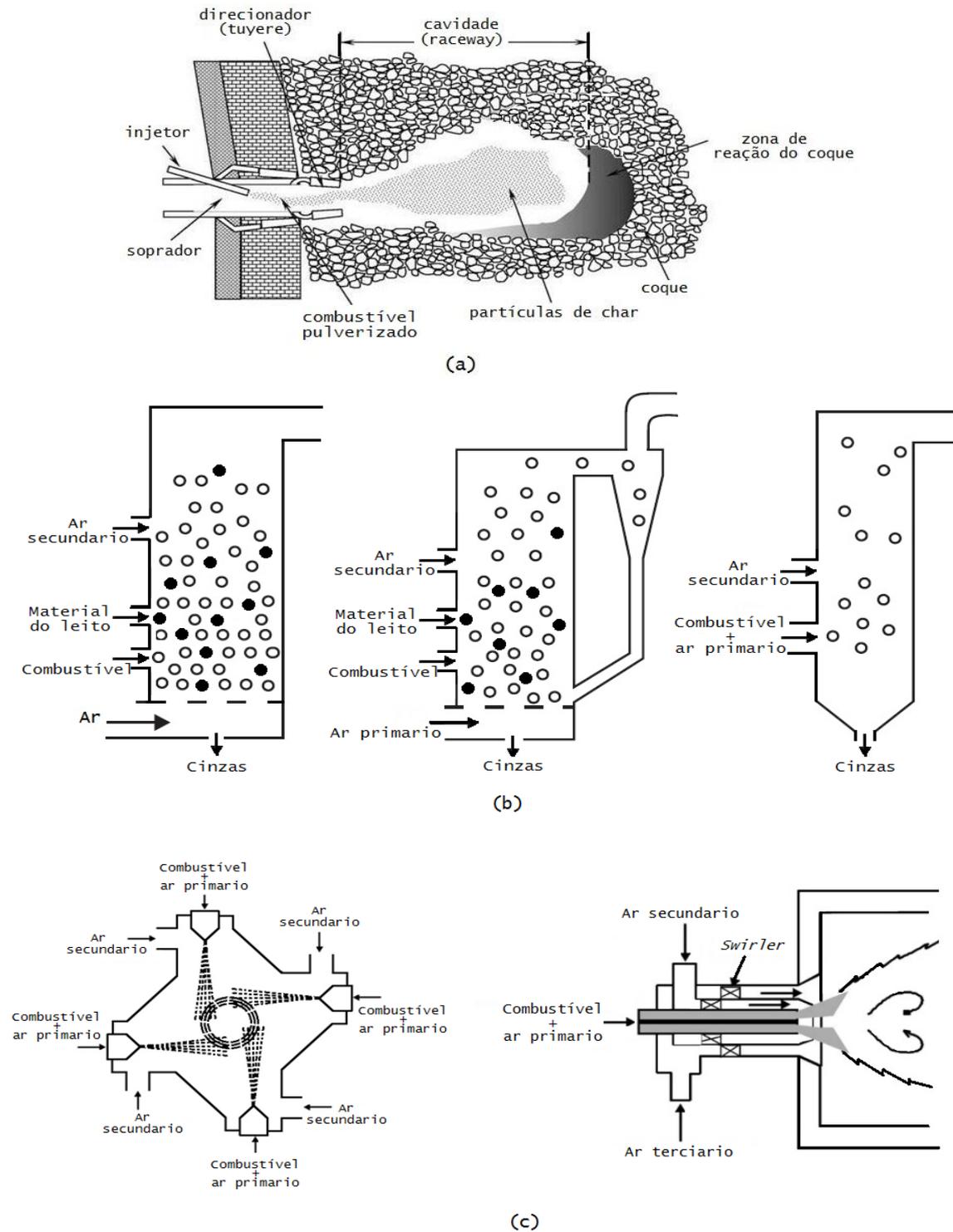
2.1 Introdução

As tecnologias disponíveis para a queima direta de combustíveis particulados foram originalmente utilizadas na combustão de carvão, e podem ser adaptadas ou modificadas para a utilização de combustíveis de biomassas. Logo, as tecnologias que são mencionadas nesta seção representam uma opção para a queima de biomassas ou a co-combustão de misturas de carvão e biomassa.

A injeção de carvão pulverizado (PCI) envolve a queima direta de grandes volumes de partículas combustíveis em altos-fornos (ou *blast furnaces*) da indústria de produção de aço. A tecnologia PCI, mostrada na Figura 2.1 (a), é baseada em um conceito simples em que o ar primário do jato de injeção transporta as pequenas partículas e se mistura com o ar quente secundário denominado *blast* fornecido pelo soprador. As correntes misturadas são aceleradas através do direcionador ou comumente conhecido como *tuyere*, formando um jato que penetra no leito compacto de coque, criando uma cavidade em forma de balão conhecido como *raceway*. O combustível entra em combustão no interior do *raceway* aquecendo o gás, e assim inicia-se a fundição do ferro com a redução da necessidade de combustão de coque (SHIOZAWA, 2013).

Uma outra tecnologia disponível é a combustão em leito fluidizado. Partículas combustíveis na faixa de 5-10 mm de diâmetro são alimentadas em uma camada quente de sólidos inertes (diâmetro: 0,5 a 3,0 mm) e são fluidizadas com correntes de ar. As partículas de combustível representam apenas 1 a 2% da massa do leito (TOPOROV, 2014). Em baixas velocidades, o ar escoava através do leito sem perturbar as partículas, e o leito permanece fixo. Em velocidades superiores à velocidade mínima de fluidização, o leito é fluidizado e o ar escoava através do leito na forma de bolhas, criando assim um leito fluidizado borbulhante (BFB) (DE JONG e VAN OMMEN, 2014). Quando as velocidades se aproximam ou são superiores à velocidade de queda livre das partículas, as partículas ficam arrastadas no ar e são levadas para fora do combustor. As partículas arrastadas são separadas dos gases de combustão em um ciclone e re-circuladas de volta ao leito, criando assim um leito fluidizado circulante (CFB). Esta recirculação proporciona maiores tempos de residência às partículas no combustor e permite que a combustão aconteça a temperaturas mais baixas (DE JONG e VAN OMMEN, 2014). Na Figura 2.1 (b) mostram-se os diferentes tipos de leito fluidizado para a combustão de partículas sólidas.

Figura 2.1- Tecnologias de conversão de combustíveis sólidos pulverizados, (a) combustão de carvão em alto-forno, tecnologia (PCI), (b) combustão em leito fluidizado borbulhante (esquerda), circulante (meio) e leito arrastado (direita), (c) queimador tangencial (esquerda) e queimador *swirl* (direita).



Fonte: Adaptado de Toporov (2014) e De Jong e Van Ommen (2014).

Tem-se também os sistemas de leito arrastado, aqui o combustível pulverizado escoou junto com o ar e é queimado ou gaseificado em um reator (DE JONG e VAN OMMEN,

2014). É necessário que o combustível seja pulverizado em um pó fino. Normalmente, 80-90% das partículas combustíveis pulverizados passam por uma peneira com abertura de 74 μm (TOPOROV, 2014). O combustível é transportado com uma pequena parte (15–25%) do ar total necessário para a combustão ou ar primário (TOPOROV, 2014). A maior parte do ar total, o ar secundário, geralmente é pré-aquecido e introduzido através das portas do reator para permitir a combustão. As partículas devolatilizam, inflamam e queimam, deixando como resíduo as cinzas, onde o tempo de residência das partículas combustíveis no queimador é tipicamente de 1 a 2 segundos, e geralmente é suficiente para uma combustão quase completa (TOPOROV, 2014).

Os queimadores utilizados nos sistemas de leito arrastados são de dois tipos: queimadores *swirl* e queimadores a jato, como os que são mostrados nas Figuras 2.1 (c). Nos queimadores a jato, o combustível e as vazões mássicas de ar primário e secundário são introduzidos no combustor como jatos sem rotação desde um arranjo de injetores. Já nos queimadores rotacionais turbulentos, o combustível, o ar primário e ar secundário são introduzidos no combustor com uma forte rotação (TOPOROV, 2014).

No entanto, uma opção que atende as exigências de combustão de partículas sólidas, é a combustão ciclônica desenvolvida em combustores ciclônicos. Segundo Gupta *et al.* (1984), devido as regiões de alta mistura produto das zonas de recirculação desenvolvidas pelo escoamento, consegue-se boas características de combustão e amplos limites de estabilidade da chama. Portanto, os combustores ciclônicos são adequados para a queima de carvões de baixa qualidade e partículas de biomassa. Também, neste tipo de combustores, os tempos de residência das partículas dentro do combustor são maiores devido ao escoamento padrão do tipo envolvente do gás que arrasta as partículas, e faz com que elas circulem por maior tempo dentro da câmara de combustão (KILIK, 1976).

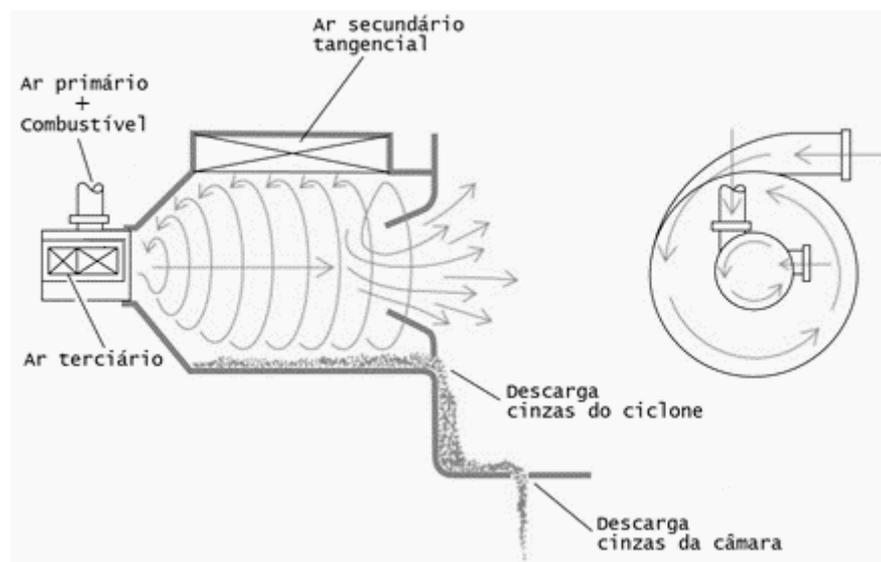
No entanto, o estudo de um combustor ciclônico resulta ser complexo devido aos diferentes fenômenos que acontecem durante a geração, desenvolvimento da turbulência e durante o processo de combustão das partículas. Portanto, é importante fazer uma descrição detalhada primeiro do funcionamento deste tipo de combustores, e posteriormente dos fenômenos que descrevem o padrão do escoamento, e as vantagens oferecidas por esta tecnologia na estabilização da chama durante a combustão. Em seguida, realiza-se uma revisão sobre os combustores ciclônicos.

2.2 Funcionamento das câmaras de combustão ciclônicas

Trata-se, tipicamente de um cilindro horizontal ou vertical com paredes refrigeradas por água ou ar, pois quando o combustível é queimado o calor é liberado em taxas elevadas (DRYDEN, 1982). De forma geral, os combustores ciclônicos podem queimar combustíveis sólidos, gasosos ou líquidos. A característica principal deste tipo de câmara de combustão é a forma como o combustível e o oxidante são introduzidos no combustor, pois isto irá definir a forma padrão de escoamento. Assim, um escoamento rotacional pode ser conseguido quando o combustível e o ar primário são introduzidos com direção tangencial às paredes da entrada do combustor, ou pode ser gerado por um *swirler* geralmente localizado na entrada do combustor para transmitir uma componente tangencial ao escoamento (SLOAN *et al.* 1986). A Figura 2.2 mostra esquematicamente uma configuração de um combustor ciclônico com entradas do combustível e o ar tangencialmente, indicadas pela direção das setas na figura.

Uma outra característica deste tipo de combustores é que o combustível é transportado com aproximadamente 15–25% do ar de combustão, também conhecido como transporte pneumático, no qual já transmite turbulência às partículas combustíveis (TOPOROV, 2014). O movimento rotacional no combustível é aumentada ainda mais pela admissão tangencial de ar secundário à elevada velocidade que ingressa no combustor.

Figura 2.2- Princípio de operação de combustores ciclônicos.



Fonte: Adaptado de Dryden (1982) e Vamvuka (2010).

Dependendo da configuração e projeto do combustor ciclônico, uma quantidade de ar terciário pode ser injetado mais a jusante para completar a combustão do combustível restante, reduzindo bastante a formação de NO_x e material não queimado. Finalmente, os gases da combustão saem da câmara de combustão através de uma contração na parte posterior do combustor (DRYDEN, 1982). Já os produtos sólidos, resultantes da combustão das partículas, podem ser removidos como cinzas volantes por sistemas de controle de partículas. Uma parte dessas cinzas junto com a camada de escória derretida que revestem o combustor, escoam pela parte inferior até sair pelos coletores ou orifícios de descarga tanto do combustor como da câmara de combustão. Os combustores ciclônicos tipicamente removem 99% dos produtos sólidos da combustão.

Os combustores ciclônicos podem queimar uma ampla gama de combustíveis como: carvão betuminoso pouco volátil, carvão de lignite, carvão antracito rico em minerais, lascas de madeira, coque de petróleo, pneus velhos, entre outros. Os combustores ciclônicos foram originalmente projetados para aproveitar quatro aspectos (SLOAN *et al.* 1986):

1. combustores menores e mais compactos.
2. menos cinzas volantes e escória por convecção.
3. flexibilidade nos tipos de combustível.
4. menor tempo e custos de preparação de combustível

Contudo, escoamentos ciclônicos promovem altas eficiências na combustão, diminuição de poluentes e se amplia o limite de estabilidade e de sopro¹ (*blow-off*) da chama. De fato, um dos principais benefícios da rotação em combustores, é que se desloca a faixa relação ar-combustível para um regime ótimo rico em combustível, reduzindo assim a sensibilidade às flutuações que ocorrem durante as operações normais do processo e ampliando os limites de *blow-off* (SLOAN *et al.* 1986).

Pode-se compreender então a principal diferença entre combustores ciclônicos e outras tecnologias de queima de combustíveis pulverizados. Em fornalhas a carvão pulverizados, as partículas de carvão se movem junto com a corrente de gás, e conseqüentemente, são necessários queimadores relativamente grandes para completar a combustão do combustível em suspensão. Diferentemente, em combustores ciclônicos, o

¹ A velocidade do sopro é a velocidade axial média do ar e do combustível para o qual ocorre extinção da chama.

combustível permanece mais tempo circulando no combustor movimentado pela turbulência. Assim, grandes quantidades de combustíveis podem ser queimadas até a combustão completa em um volume relativamente pequeno.

2.3 Características dos combustores ciclônicos

Acredita-se que a principal característica dos combustores ciclônicos é o padrão do escoamento. Este padrão de escoamento acoplada à elevada turbulência criada no interior do reator são responsáveis pela formação de zonas de recirculação ou zonas de escoamento reverso no interior do dispositivo. Em combustão, essas zonas de recirculação são extremamente importantes, porque ajudam a promover uma melhor mistura entre o ar e o combustível, além de ajudar na estabilização da chama e no controle de poluentes. As regiões de recirculação proporcionam também uma fonte de calor contínua para uma combustão estável, devido a que os produtos de combustão quentes escoam na direção a montante e dão origem à ignição da mistura ar-combustível fresca que entra. A obtenção de velocidades baixas é também essencial, uma vez que as velocidades de chama para a maioria dos combustíveis disponíveis são muito mais baixas que as velocidades médias em câmaras de combustão (KILIK, 1976).

Pode-se entender então, que a principal consequência da aplicação de rotação a um escoamento, são as formações das zonas de recirculação e a importância destas zonas no funcionamento de um combustor ciclônico, pelo que torna-se necessário descrever mais extensamente o desenvolvimento deste e de outros fenômenos de turbulência associados nos seguintes parágrafos. Desta forma, o estudo do padrão de um escoamento ciclônico inicia-se explicando os meios e níveis de geração da componente rotacional em um escoamento.

No escoamento de um fluido, a geração de rotação é a transmissão de uma componente tangencial ou azimutal à velocidade do fluido (SLOAN *et al.* 1986). Em câmaras de combustão, geralmente o gerador desta componente tangencial na velocidade é a direção tangencial do ar quando é introduzido no combustor, ou pode ser usado um *swirler* posicionado na entrada do combustor da câmara de combustão (KILIK, 1976). Porém, a rotação transmitida ao escoamento deve ser adequadamente prevista, porque uma rotação excessiva promoveria instabilidades da chama, ou poderia extinguir a chama se a velocidade axial não for reduzida por causa dessa excessiva rotação. Em combustores com *swirler* existe uma queda de pressão no escoamento quando o fluido atravessa o *swirler*, e a zona de

recirculação formada pela separação do vórtice gera um bloqueio aerodinâmico, onde reduz a velocidades axial, sendo necessário para estabilizar a chama (DA SILVA, 2013). O número de *swirl* é útil como uma medida relativa da quantidade de movimento rotacional transmitido ao escoamento. (SLOAN *et al.* 1986).

O número de *swirl* é definido como a relação entre o fluxo axial da quantidade de movimento angular e o fluxo axial da quantidade de movimento axial. A Eq. (2.1) expressa matematicamente esta relação.

$$S' = \frac{\int r w \vec{v} \cdot d\vec{A}}{\bar{R} \int u \vec{v} \cdot d\vec{A}} \quad (2.1)$$

Onde \bar{R} é o raio hidráulico. Escoamentos com valores de número de *swirl* menores que 0,4 são considerados moderados e não produzem recirculação no escoamento. Escoamentos com movimentos rotacionais de interesse prático em combustão operam sob condições de forte *swirl*, isto é, $S' > 0,6$ (LEFEBVRE e BALLAL, 2010). Uma expressão para o cálculo deste parâmetro para *swirlers* com ângulo de palheta constante e do tipo anular é dado pela Eq. (2.2):

$$S' = \frac{2}{3} \left[\frac{1 - (D_{hub}/D_{sw})^3}{1 - (D_{hub}/D_{sw})^2} \right] \tan\theta \quad (2.2)$$

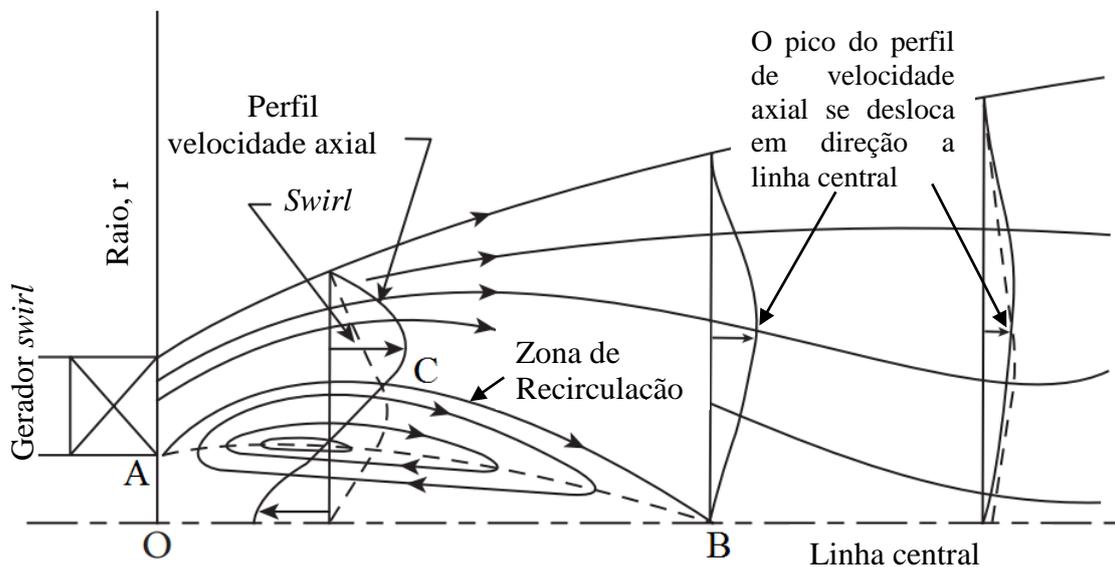
Onde D_{hub} é o diâmetro do *hub* e D_{sw} é o diâmetro de saída do *swirler*. O diâmetro do cubo é determinado quando se tem necessidade de proporcionar um espaço para um injetor central. Logo, a partir da Eq. (2.2) um *swirler* precisaria ter um ângulo de palheta mínimo de 38° e relação entre D_{hub}/D_{sw} de 0,5 para obter uma escoamento com número de *swirl* de 0,6 (LEFEBVRE e BALLAL, 2010). Kilik (1976) determinou experimentalmente a influência de parâmetros geométricos de *swirlers* como: o ângulo de palheta, a relação espaço-corda e a relação de aspecto sobre as características de turbulência das regiões de recirculação provocadas no escoamento. Os resultados por ele obtidos também mostram que *swirlers* de palhetas curvas são mais eficientes que as de palhetas planas, porque como a turbulência e as viscosidades turbulentas são anisotrópicas, as tensões mais dominantes seriam \overline{ww} , \overline{uw} e \overline{uu} e todas as outras tensões são pequenas. Portanto, palhetas curvas devem produzir grandes zonas de recirculação e fortes zonas de cisalhamento para uma baixa queda de pressão.

2.3.1 Formação de zonas de recirculação

Após o fluido passar pelo *swirler*, um leve comportamento oscilatório é iniciado em um determinado local a jusante (LEFEBVRE e BALLAL, 2010; KILIK, 1976; SLOAN *et al.* 1986). Essas oscilações aumentam em amplitude com a distância axial a jusante, até que as correntes de fluido, formadas por um conjunto de partículas fluidas seguindo a mesma trajetória, sejam quebradas.

Inicialmente, se produzirá um elevado gradiente de pressão adverso na direção do escoamento (KILIK, 1976; SLOAN *et al.* 1986). Fisicamente, nos escoamentos rotacionais, a conservação da quantidade de movimento angular resulta na geração de um escoamento de vórtice livre na qual a velocidade tangencial w aumenta à medida que o raio diminui até que alcança um valor de zero quando o raio é igual a zero devido a ação da viscosidade (LEFEBVRE e BALLAL, 2010). Na Figura 2.3 pode-se observar a explicação física dos escoamentos rotacionais. A figura mostra uma zona de recirculação a jusante do gerador de turbulência, a evolução dos perfis de velocidade axial em diferentes pontos e também o posicionamento da zona de recirculação em relação à linha central axi-simétrica do escoamento.

Figura 2.3- Descrição da formação de zonas de recirculação em escoamentos rotacionais.



Fonte: Adaptado de Lefebvre e Ballal, (2010).

Na região de recirculação mostrada na Figura 2.3 pode-se ver que a região de recirculação está contida dentro das curvas ACB, sendo B o ponto de estagnação. O escoamento fora do ACB é o escoamento principal e o perfil de velocidade deste na entrada definirá o comprimento da recirculação ao longo da curva sólida ACB. Condições de

velocidade axial zero são representadas pela curva tracejada AB. Todos os componentes de velocidade decaem na direção a jusante. Após o ponto de estagnação as velocidades axiais reversas desaparecem, e mais a jusante o pico do perfil de velocidade axial se desloca em direção à linha central à medida que o efeito do *swirler* diminui (LEFEBVRE e DALLAL, 2010).

O perfil da velocidade tangencial geralmente é tratada em termos de escoamento de vórtice forçado e escoamento de vórtice livre. Escoamentos de vórtice forçado são descritos como correntes de fluido circulares que rotam ou giram em torno de seu próprio eixo (em um sentido Euleriano). Em contrapartida, escoamentos de vórtices livres seguirá correntes de fluido circular sem rotação sobre seu próprio eixo. Os perfis de velocidade tangencial gerados em *swirlers* geralmente assumem uma combinação das distribuições de vórtices forçados e livres (SLOAN *et al.* 1986).

Leves aumentos no movimento tangencial fazem com que a corrente fluida principal se desloque suavemente para fora da linha central, formando uma grande deflexão em espiral. Para escoamentos com movimento rotacional elevado, um segundo distúrbio no escoamento evolui denotando o modo de hélice dupla. Nesse caso, ocorre simultaneamente uma deflexão e um cisalhamento da corrente fluida principal para fora da linha central. A corrente fluida é cortada em uma camada em expansão que se envolve por várias revoluções na forma de uma hélice. Essas deflexões e distúrbios são referidos como formas estruturais de grande amplitude e são decididamente estáveis e estacionárias no tempo (SLOAN *et al.* 1986). As demais formas de perturbação contêm um ponto de estagnação interna definida e são especificamente classificadas como colapsos de vórtices.

Um outro tipo de distúrbio registrado ocorre quando a corrente fluida desviada e cortada é induzida para envolver firmemente de volta o ponto de deflexão, o ponto A na Figura 2.3. O resultado é uma bolha severamente achatada conhecida como zona de recirculação. Um aumento no grau de *swirl* no escoamento pode provocar outro tipo de perturbação. Nesse caso, a corrente fluida desviada não gira do mesmo modo helicoidal que o escoamento circundante, mas oscila lateralmente num plano preferido. Fragmentos da linha de corrente levemente cortados parecem se quebrar ou se alternar de um lado para o outro. O distúrbio conhecido como separação do vórtice pode ser provocado por grandes ângulos de palheta do *swirler*, onde a corrente fluida deformada a jusante do ponto de deflexão é transformada em uma configuração em espiral que segue uma trajetória helicoidal

ou circular em torno da linha central. O colapso de espiral não se espalha simetricamente a partir do ponto de estagnação, ponto B na Figura 2.3. Um distúrbio oscilatório imediatamente a montante do ponto de estagnação guia sucessivamente as partículas fluidas em diferentes trajetórias helicoidais (SLOAN *et al.* 1986).

Para escoamentos com elevado número de *swirl*, o colapso da bolha evolui a partir do colapso de espiral. O colapso da bolha é identificada por uma leve variação no núcleo do vórtice que sofre uma rápida e abrupta desaceleração, formando um ponto de estagnação livre seguida por uma região de escoamento reverso. A corrente fluida de dentro do núcleo se espalha simétrica e suavemente a partir do ponto de estagnação, e envolve a região de recirculação. No entanto, a parte posterior da bolha geralmente não é fechada devido a um complexo processo de enchimento e esvaziamento que troca fluidos entre a zona de recirculação e o escoamento exterior. Logo, imediatamente a jusante da bolha um novo núcleo do vórtice é estabelecido, o qual é significativamente maior que o núcleo do vórtice a montante da bolha. O novo núcleo pode desviar e frequentemente forma uma segunda separação de vórtice, antes de quebrar em turbulência de grande escala (SLOAN *et al.* 1986).

Para escoamentos com elevada rotação apenas a forma do colapso da bolha é evidente. Aumentar o *swirl* deslocará a bolha a montante até alcançar um limite sólido. Além disso, aumentos adicionais no movimento tangencial podem levar a formação de um vórtice em cascata com escoamento reverso ao longo da linha central (SLOAN *et al.* 1986).

Todos os perfis de distúrbios descritos nos parágrafos anteriores seguem uma ordem definida em sucessão à medida que o número de *swirl* ou número de Reynolds é aumentada, embora que para números de Reynolds suficientemente grandes, unicamente os colapsos de espiral e quase axissimétricos podem ser observados. Acredita-se que a separação de vórtice seja o principal fenômeno responsável pela formação das zonas de recirculação da linha central em muitos sistemas de combustão com *swirlers*, e não simplesmente um precursor de um mecanismo de número de Reynolds mais elevado (SLOAN *et al.* 1986).

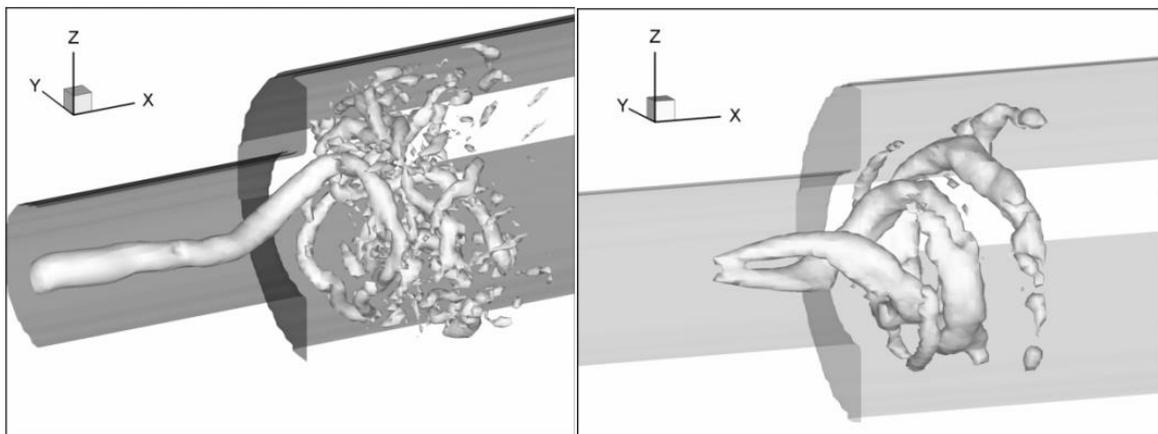
Conforme descrito anteriormente, desde o ponto de vista da mecânica dos fluidos entende-se que a formação de zonas de recirculação é essencialmente um fenômeno da aerodinâmica do combustor. Portanto, dados isotérmicos (sem reações de combustão) devem ser o ponto de partida na análise de combustores ciclônicos, antes mesmo de considerar as reações complexas dos processos de combustão e outros efeitos relacionados ao carregamento de partículas sólidas (DA SILVA, 2013).

2.3.2 Tamanho da zona de recirculação

Segundo Sloan *et al.* (1986), uma zona de recirculação consiste de um jato rotacional direto e uma zona de escoamento reverso. Essas parcelas de escoamento direto e reverso exibem diferenças significativas de quantidade de movimento axial e angular no escoamento. Isso cria uma região intermediária entre as duas partes caracterizada por um grande cisalhamento turbulento, níveis de flutuação e intermitência direcional, onde possivelmente essa ação de cisalhamento leva à geração da precessão² do núcleo do vórtice ou PVC, que por sua vez contribui para as flutuações aleatórias, a instabilidade da região e a variação espacial da localização da bolha ou zona.

Teoricamente, a precessão do núcleo do vórtice é um fenômeno de separação de vórtice com estruturas transientes tridimensionais, responsável pela geração de regiões de elevado cisalhamento e áreas de intensa mistura. Estudos para as possíveis estruturas do PVC começaram na década dos anos 70s no trabalho de Syred *et al.* (1975). O fenômeno ocorreu assim que um redemoinho gerou uma zona de recirculação central (SYRED e BEER, 1974; GUPTA *et al.* 1984). Atualmente com o uso de equipamentos de aquisição de dados de alta qualidade e modernos computadores pode-se capturar imagens do fenômeno e estudar seus efeitos na combustão (SYRED *et al.* 1997). A Figura 2.4 mostra o fenômeno do PVC simulado com técnicas avançadas. Pode-se observar que grandes estruturas resultam da separação do vórtice e das camadas de cisalhamento, e estas afetam diretamente a estabilização da chama, levando a flutuações por liberação de calor e instabilidades de combustão (DUWIG e FUCHS, 2007).

Figura 2.4- Visualização instantânea do núcleo de vórtice (esquerda) e núcleos de vórtice em dobre hélice (direita) obtida com técnicas avançadas de LES e POD. Fonte: Duwig e Fuchs (2007).



² *Precessão* é um fenômeno físico que consiste na mudança do eixo de rotação de um objeto (Wikipédia).

Foi observado que o PVC ocorre quando o núcleo do vórtice é deslocado do eixo central de simetria. Portanto, um novo centro precessional do vórtice seria formado sobre o centro geométrico do combustor, e parte do escoamento é apertado entre o centro precessional do vórtice e a parede interna do combustor. Isto causa um aumento substancial na velocidade tangencial devido as considerações da quantidade de movimento angular do escoamento (SYRED *et al.* 1997).

A medida que o escoamento reverte, o vórtice axial do jato rotacional desaparece do eixo central, este efeito é denominado como separação do vórtice. Infelizmente, o campo de escoamento resultante é inerentemente instável. Conseqüentemente, a modelagem e o entendimento do colapso do vórtice é então, uma questão fundamental na estabilização da chama (DUWIG e FUCHS, 2006). Grandes estruturas resultantes da quebra do vórtice e das camadas de cisalhamento em redemoinhos afetam diretamente a zona de recirculação central. Essas estruturas causam grandes flutuações determinísticas no campo de escoamento.

Em geral, acredita-se que o PVC seja responsável por elevados níveis de flutuação de pressão e temperatura e pelos elevados níveis de turbulência associados à mistura dentro (ou próximo) dos limites da zona de recirculação. Sob condições de combustão é mostrado que o PVC afeta o campo de temperatura. Isto é um resultado direto do campo de velocidades. As regiões de elevado cisalhamento na região de escoamento apertado leva a uma intensa mistura (DUWIG e FUCHS, 2006; KILIK, 1976; DA SILVA, 2013).

Outros fatores importantes que produzem diferentes configurações das zonas de recirculação são as possíveis combinações das componentes tangenciais na velocidade, da geometria do combustor e da relação ar/combustível. Estes fatores serão abordados nas seguintes subseções.

2.3.3 Efeitos da geometria do combustor

Os campos de escoamento turbulento na câmara de combustão são fortemente influenciados pela geometria, que normalmente possui uma entrada em expansão e uma saída de contração (LIU *et al.* 2017). Em particular, foram observados que a largura e o comprimento máximos de uma zona de recirculação aumentam com o diâmetro da câmara de combustão, principalmente porque ele define o espaço de confinamento da zona de recirculação principal. Embora diâmetros menores na câmara reduzam custo de capital, os

diâmetros maiores reduzem a interferência entre o campo de escoamento e o limites do combustor, fornecendo uma zona de recirculação maior e mais vantajosa para a estabilização da chama (SLOAN *et al.* 1986).

Em diversos estudos realizados por McCallum (Bafuwa e McCallum, 1973; Beltagui e McCallum, 1976; Beltagui e McCallum, 1988) foi encontrado que um mesmo gerador de *swirl* pode proporcionar diferentes perfis de velocidade quando se muda a longitude, característica que é o diâmetro da câmara de combustão. Ao mesmo tempo, o tamanho e forma da zona de recirculação central é dependente do diâmetro do combustor, e não do diâmetro das pás do *swirler*.

O *quarl* serve de guia para as linhas de corrente seguirem por essa trajetória inclinada, promovendo assim a divergência da corrente fluida e intensificando o gradiente de pressão adversa na linha central (SLOAN *et al.* 1986). Qualquer meio de mudar o campo de pressão, tal como um cubo (*hub*) ou defletor a longo da linha central da entrada, ou até mesmo um desequilíbrio na vazão mássico entre os jatos primário e secundário podem ter efeitos pronunciados no colapso de vórtices.

Um sistema em combustão afeta o campo de escoamento acelerando a velocidade média axial, expandindo o gás e diminuindo a massa específica. Devido que o aumento da temperatura e a aceleração do gás que acompanham a reação também aumentam a quantidade de movimento do jato no denominador, em relação ao termo do movimento angular no numerador, o número de *swirl* aparente diminui para um dada localização axial (KILIK, 1976). Assim, os padrões de recirculação observados em sistemas isotérmicos podem exigir um número de *swirl* de entrada um pouco maior nos sistemas de combustão, para gerar uma bolha de recirculação de magnitude, força e localização comparável.

Segundo Sloan *et al.* (1986), tanto simulações como observações demonstraram que a combustão geralmente faz com que a bolha de recirculação aumente em largura e reduza em comprimento. Embora a largura ou tamanho da zona de recirculação possa ter aumentado com a combustão, a vazão mássica da recirculação é menor devido à diminuição considerável na massa específica.

2.3.4 Benefícios das zonas de recirculação

As zonas de recirculação tradicionalmente têm sido consideradas como reservatórios de calor e de espécies químicas ativas, que transportam ciclicamente os produtos de

combustão quentes das regiões a jusante para a região da chama (DA SILVA, 2013; SLOAN *et al.* 1986). A alta temperatura dos produtos servem como fonte de energia para o pré-aquecimento do combustível e, conseqüentemente, para a evaporação, a devolatilização e a ignição.

Assim, em um sistema reativo acredita-se que o principal benefício que uma zona de recirculação produz é a estabilidade da chama, e por sua vez, a estabilidade da chama está relacionada à eficiência do combustor como uma função dos padrões resultantes da chama e do escoamento (SLOAN *et al.* 1986). Logo, ambos conceitos, a eficiência e a estabilidade da combustão, são inversamente proporcionais à velocidade axial média no combustor. Ainda segundo Kilik (1976), o termo de estabilidade da combustão é aplicado à relação ar-combustível para a qual uma chama estável pode ser mantida, considerando que na combustão as diferentes relações ar-combustível para um mesmo combustível, são produtos da heterogeneidade da qualidade energética do combustível, principalmente quando se trabalha com carvão, biomassas e outros resíduos de baixo poder calorífico. Logo, um combustor deve ser capaz de trabalhar em uma ampla faixa de relações ar-combustível sem extinguir a chama, e a única forma de alcançar isso é criando baixas velocidades e regiões de mistura boas no combustor.

Alternativamente, para a estabilidade da combustão, considera-se a velocidade máxima do ar que pode-se obter sem a extinção da chama, e está muito próxima da velocidade da chama para o combustível utilizado (KILIK, 1976).

Um benefício importante que se consegue está relacionado ao espaço de ancoragem da chama. Devido à excelente mistura entre o ar e o combustível que se consegue com os escoamentos rotacionais, se reduz os comprimentos de chama, e conseqüentemente encurta-se o comprimento da câmara de combustão necessário para a combustão completa (SLOAN *et al.* 1986).

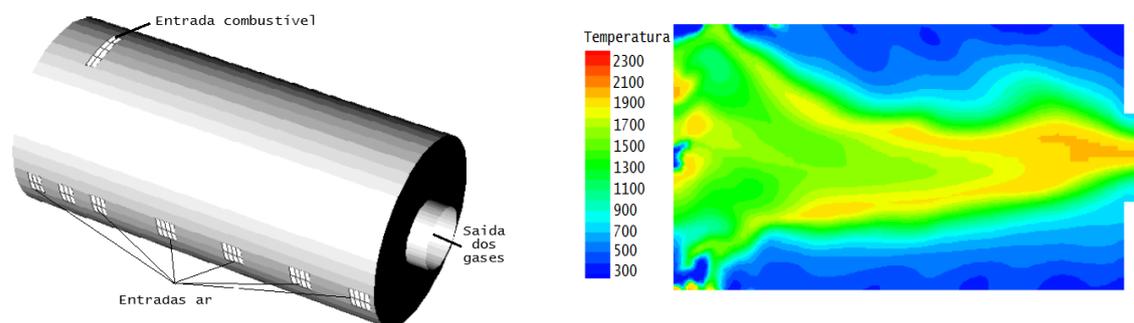
Porém, um aumento excessivo do nível de rotação pode provocar uma migração dos limites da curva que contém a região de recirculação em direção a montante, e muitas vezes até o tubo de entrada. A rotação excessiva pode também provocar outras perturbações, tais como escoamento reverso estendido em todo o comprimento do combustor, aproximando-se de um escoamento reverso colunar (em cascata) ou de uma região de velocidade adiantada rodeada por uma região de escoamento anular reverso desenvolvida na parte posterior da bolha (SLOAN *et al.* 1986).

2.4 Revisão bibliográfica de estudos com câmaras de combustão ciclônicas usando simulação numérica computacional

Com o intuito de investigar sobre os modelos disponíveis (radiação, turbulência, combustão) e outros aspectos relacionados à simulação numérica de câmaras ciclônicas, nesta seção descrevem-se diferentes estudos encontrados na literatura científica sobre câmaras de combustão ciclônicas que utilizaram simulação numérica computacional envolvendo queima de biomassa. Os estudos pesquisados nesta revisão bibliográfica revelam diversas configurações e geometrias de câmaras ciclônicas.

Kops e Malte (2004) realizaram a simulação de um combustor ciclônico comercial com queima em suspensão de madeira pulverizada. A Figura 2.5 mostra a geometria do combustor e os contornos de temperatura obtidos nesse estudo. Os objetivos principais dessa pesquisa foram a simulação do combustor e as previsões das concentrações NO_x na queima de partículas de madeira. As simulações foram realizadas em regime permanente usando o software comercial ANSYS FLUENT. Os modelos de turbulência utilizados foram $k - \varepsilon$ padrão, grupo renormalizado RNG $k - \varepsilon$ e o modelo de tensões de Reynolds (RMS). Foi utilizada também o modelo DPM para o acoplamento entre as partículas e a fase gasosa. O tamanho das partículas de madeira pulverizadas simuladas estão na faixa de 25 a 575 μm . Nas conclusões desse trabalho, os autores indicam que as concentrações de CO e HCN na saída indicaram que as reações químicas não foram completadas no momento em que os gases passam pela restrição da parte posterior do queimador.

Figura 2.5- Geometria e resultados do combustor ciclônico estudado por Kops e Malte (2004).

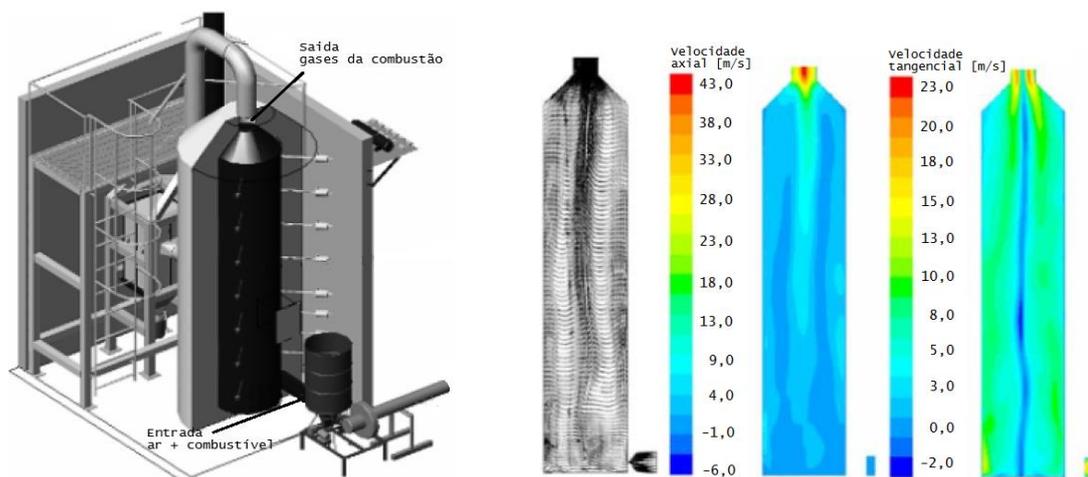


Fonte: Adaptado de Kops e Malte (2004).

De Souza *et al.* (2010) realizaram simulações numéricas em ANSYS FLUENT de uma câmara de combustão ciclônica com paredes de água (vide na Figura 2.6) desenvolvida pelo Grupo de Energia, Biomassa e meio Ambiente (EBMA) da Universidade Federal do

Pará (UFPA), utilizando como combustível serragem de madeira com tamanhos de partícula entre 20-400 μm . Os resultados desse estudo numérico mostraram a distribuição da velocidade axial, tangencial e radial dentro da câmara, além da distribuição de temperaturas e concentração das espécies decorrente da combustão. Uma das principais observações que os autores fizeram foi que ao longo do escoamento, a velocidade rotacional se dilui à medida que a temperatura aumenta na direção axial, sendo a velocidade de reação química inversamente proporcional à temperatura. O aumento da temperatura na direção axial faz com que a componente radial da velocidade diminua favorecendo a componente axial de maneira que os gases de combustão chegam majoritariamente com velocidade axial na saída da câmara.

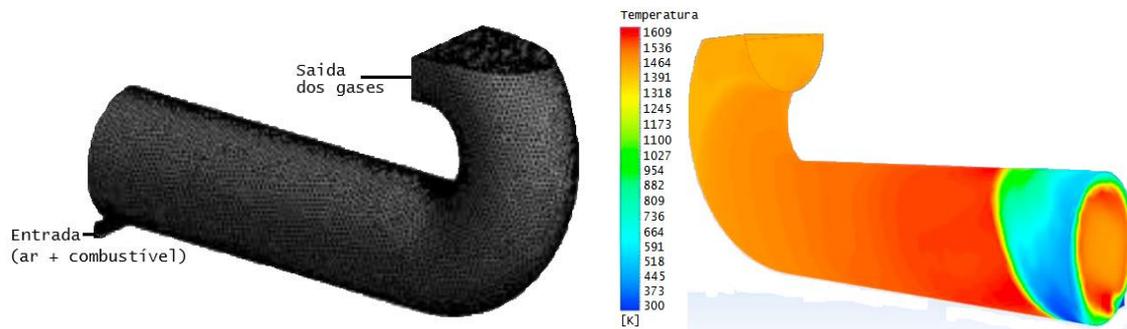
Figura 2.6- Geometria e resultados da câmara ciclônica estudada por De Souza *et al.* (2010).



Fonte: Adaptado de De Souza *et al.* (2010).

Lima *et al.* (2017) realizaram uma modelagem computacional da queima de biomassa pulverizada em uma câmara de combustão ciclônica horizontal de pequena escala, usando o software comercial ANSYS FLUENT. A geometria da Figura 2.7 mostra que o reator utilizado tem uma única entrada para o combustível e o ar, portanto uma mistura de ar e biomassa pulverizada entram tangencialmente à parede da câmara. A abordagem utilizada foi Euler-Lagrange para o acoplamento da fase gasosa e a fase particulada, respectivamente. O modelo de turbulência utilizado foi o grupo renormalizado RNG $k - \varepsilon$, e a radiação foi modelada com o modelo P1. Nos resultados obtidos, as frações mássicas das espécies mostraram que as reações de combustão ocorrem completamente nos primeiros 0,55 m da câmara. Além disso, mostraram os perfis e vetores de velocidade, campos de temperatura (mostrado na Figura 2.7 lado direito) e a distribuição de frações mássica de espécies.

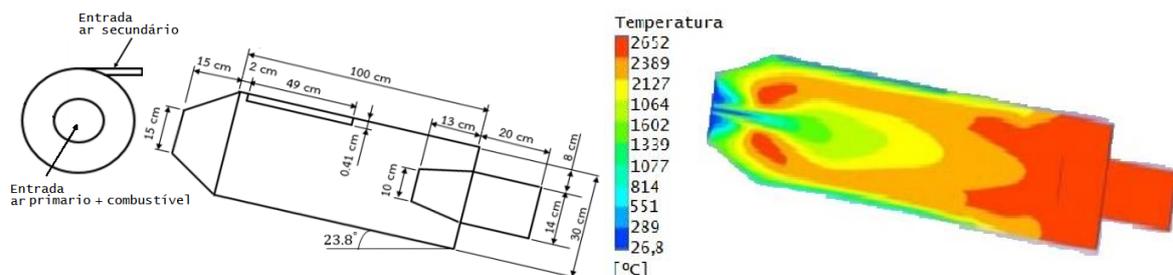
Figura 2.7- Malha computacional e resultados da câmara ciclônica estudada por Lima *et al.* (2017).



Fonte: Adaptado de Lima *et al.* (2017).

Phasomprayoch *et al.* (2018) investigaram o comportamento da combustão de resíduos concentrados da indústria do álcool da Tailândia em um câmara de combustão ciclônica. Utilizando o software ANSYS FLUENT eles determinaram a quantidade de excesso de ar adequada para a combustão dos resíduos concentrados, o qual era o objetivo principal da pesquisa. A geometria da câmara utilizada é mostrada na Figura 2.8. A malha computacional do combustor consistia de 2 milhões de elementos. O modelo de turbulência utilizado foi $k - \epsilon$ padrão e um modelo de combustão não-prémisturado. Nas simulações, o ar secundário e os resíduos concentrados entraram no combustor a temperaturas de 250 e 90 °C, respectivamente. Os resultados mostraram que ar com 100-120% do ar teórico foi adequado para a combustão desses resíduos combustíveis, devido a que essas quantidades de ar resultaram em temperaturas altas, e formaram o movimento envolvente dentro da câmara. No lado direito da Figura 2.8 mostram-se os contornos de temperatura dentro do combustor para o caso com 120% do ar teórico. A temperatura média para esta condição foi de 2119 °C, e foi reportado um número *swirl* de 11,3.

Figura 2.8- Geometria e resultados da câmara de combustão ciclônica estudada por Phasomprayoch *et al.* (2018).

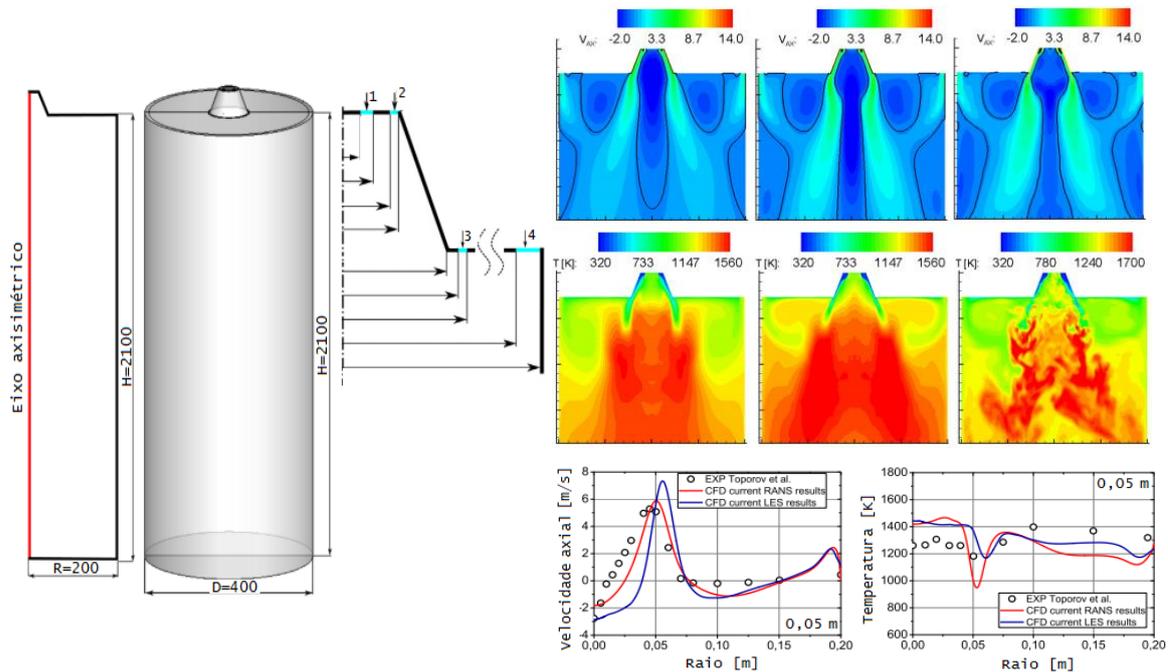


Fonte: Adaptado de Phasomprayoch *et al.* (2018).

Uma análise detalhada do campo de escoamento com e sem combustão de um combustor *swirl* usando diferentes modelos de turbulência foi realizado por Warzecha e Boguslawski (2014). A pesquisa foca na simulação numérica da combustão de carvão pulverizado em ambientes de oxi-combustão e ar, utilizando modelos de turbulência RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) e LES (Large Eddy Simulations). A câmara utilizada na pesquisa é um cilindro vertical com comprimento de 2.1 m e diâmetro interno de 0,4 m com queimador *swirl* localizado no topo da câmara de combustão, como pode ser visto na esquerda da Figura 2.9. Na entrada 2 do combustor, o gás secundário entra com elevada rotação ou número *swirl* igual a 1,2, o qual indica a relação entre a velocidade tangencial e axial do escoamento. As simulações foram realizadas no software comercial ANSYS FLUENT. Para as simulações com o modelo de turbulência $k - \epsilon$ o solver foi configurada para ser 2D axisimétrico e para o modelo LES a geometria foi totalmente 3D. A iteração cinética química-turbulência foi modelada usando o modelo taxa finita/dissipação turbulenta. As partículas de carvão foram simuladas com o modelo DPM (modelo de fase discreta) no marco de referência lagrangiana com acoplamento de uma via. A radiação foi calculada pelo modelo DO (ordenadas discretas) com o WSGGM (modelo de soma ponderada de gases cinzas) para as previsões da emissividade.

Comparações dos resultados das simulações da combustão de carvão pulverizado em ar e oxi-combustão mostraram diferenças significativas no perfil de temperaturas, principalmente próximas à saída do combustor. Embora ambos os modelos, RANS e LES, preveem fortes zonas de recirculação interna, resultados gerais muito melhores foram obtidos usando a simulação com o modelo LES, o qual detectou a zona de recirculação externa. No lado direito da Figura 2.9, na parte superior, mostram-se os contornos de velocidade axial para casos simulados com os modelos de turbulência, RANS e LES vista de esquerda à direita respectivamente. Na parte central da mesma figura mostram-se os contornos de temperatura do gás para as simulações com os métodos RANS, LES, valores médios e LES valores instantâneos, vista de esquerda à direita, respectivamente. Por sua vez, na parte inferior da Figura 2.9, são mostradas as curvas da velocidade axial e a temperatura do gás em função do raio da câmara de combustão das simulações com os modelos RANS e LES, comparadas com resultados experimentais realizadas no forno *swirl*. Essas curvas foram registradas a uma distância de 0,05 m da saída do queimador.

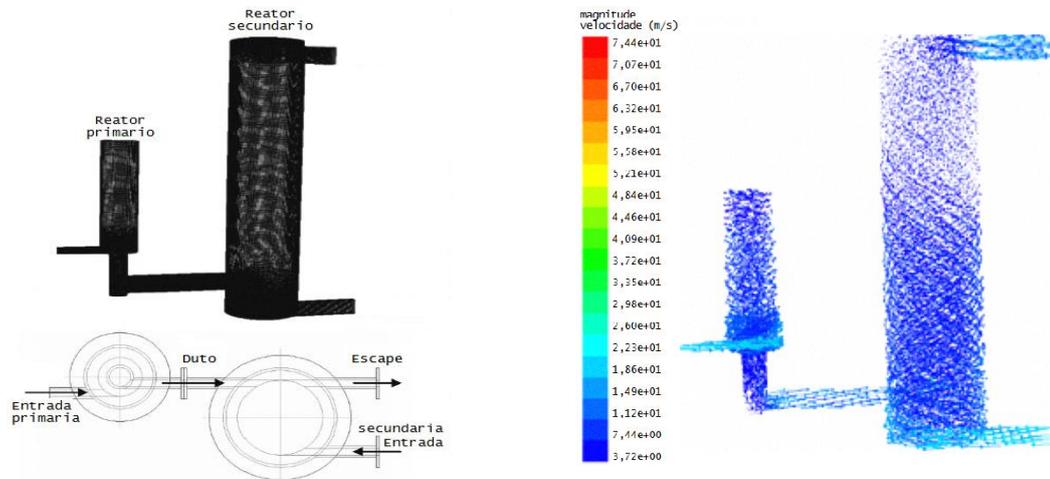
Figura 2.9- Geometria e resultados do combustor *swirl* usado nos estudos de Warzecha e Boguslawski (2014).



Fonte: Adaptado de Warzecha e Boguslawski (2014).

O campo de escoamento de um combustor ciclônico em escala de laboratório para a co-combustão de misturas de biomassa e carvão foi estudado por Ikram *et al.* (2009), por meio de simulações numéricas em CFD. O projeto do combustor consiste de dois estágios, onde o reator primário é para a gaseificação e devolatilização da biomassa, seguido de um reator secundário para a combustão completa do combustível. Os dois reatores são conectados por um duto, como se vê no lado esquerdo da Figura 2.10. Pode-se observar também que todas as entradas e as saídas são tangencialmente às paredes do combustor para criar a componente tangencial, uma pressão uniforme e maximizar a turbulência. O combustor ciclônico foi projetado para produzir alta turbulência no combustor para obter uma mistura adequada do ar e o combustível. As simulações foram realizadas usando o software FLUENT, o modelo de turbulência utilizado foi RNG $k - \epsilon$. Os resultados obtidos por eles são mostrados no lado direito da Figura 2.10, onde os vetores de velocidade em ambos reatores indicam que foram alcançadas um escoamento rotacional dentro do conjunto do combustor.

Figura 2.10- Geometria e resultados do combustor ciclônico estudado por Ikram *et al.* (2009).



Fonte: Adaptado de Ikram *et al.* (2009).

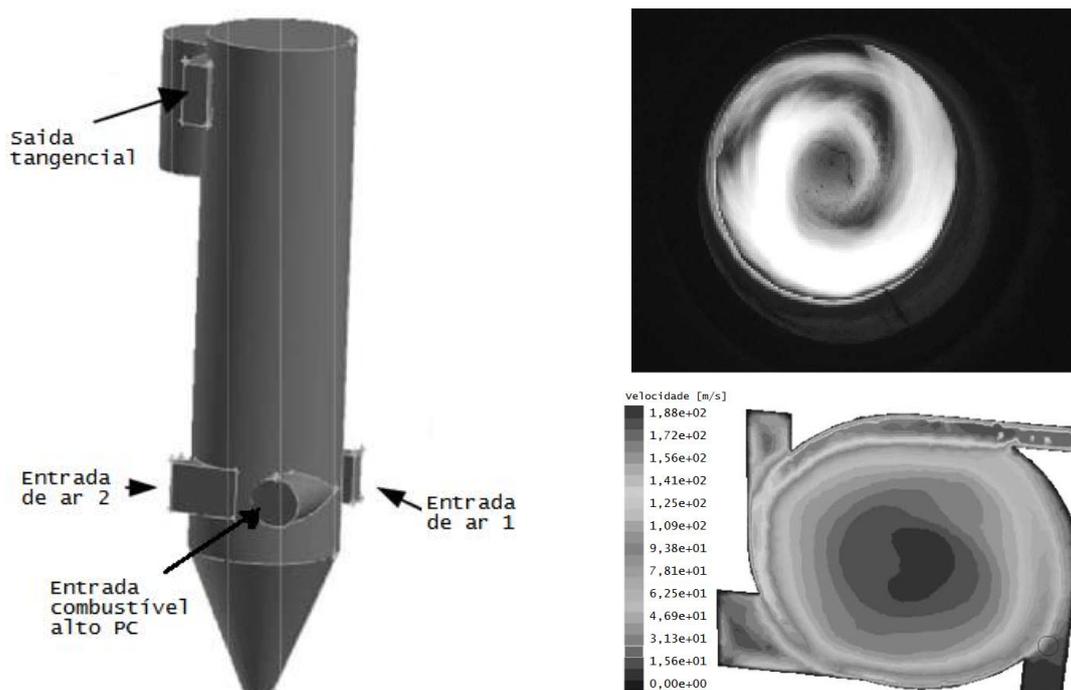
Com o objetivo de calcular a eficiência térmica de uma caldeira ciclônica através de medições, Carneiro *et al.* (2017) realizou experiências usando serragem de cedro como combustível. A caldeira usada nesse trabalho de investigação foi projetada e construída pela UFPA (Universidade Federal do Pará). A principal vantagem desta caldeira com as caldeiras comerciais é a sua parede de água, ou seja, que as partículas combustíveis se queimam enquanto se movimentam tangencialmente em relação à linha do eixo do forno, e troca calor com a água que flui para fora da parede do reator. Os resultados das experiências realizadas atribui à caldeira uma eficiência térmica de 44 %, conversão da energia da biomassa na combustão de 98 % e as emissões de CO nos gases de exaustão foram cerca de 139 ppm. Observou-se que a operação da caldeira é eficiente para testar diferentes espécies de biomassa da Amazônia, bem como fornecer novos dados experimentais.

Um trabalho de investigação experimental e por simulações em CFD foi realizado por Syred *et al.* (2004) em uma pequena planta de cogeração de pequena escala, que utiliza em série um gaseificador ciclônico e um combustor ciclônico. Neste sistema o combustor ciclônico é capaz de queimar diretamente os gases combustíveis que saem do gaseificador, sem precisar um complexo sistema de limpeza, devido a que o gaseificador foi projetado com um coletor de vórtice e um coletor central para maximizar a separação das partículas do escoamento, e remover restos de álcalis e outros metais pesados que se aglomeram com as partículas de cinzas. Logo, os gases produto da combustão são expandidos em uma turbina a gás. Os combustíveis usados foram um tipo de serragem com distribuição de tamanhos na

faixa de 0,063 a 2 mm e um pó de madeira comercial com amostras de tamanho do 50% < 0,3 mm.

O combustor ciclônico dessa pequena planta produz um forte escoamento rotacional com bons padrões de mistura, por conta de possuir várias entradas tangenciais, das quais duas são entradas para o ar, uma entrada para um combustível de elevado poder calorífico e uma entrada para combustível de baixo poder calorífico. O combustor têm uma orientação vertical e têm uma capacidade máxima de entrada térmica de 550 kW. Este combustor foi desenhado com uma câmara longa para permitir que a chama se movimente para cima ou para baixo dependendo da entrada térmica variável e qualidade do combustível, proporcionando tempo suficiente para a queima das partículas. A Figura 2.11 mostra a geometria do combustor ciclônico descrito.

Figura 2.11- Geometria do combustor ciclônico e resultados obtidos no estudo de Syred *et al.* (2004).



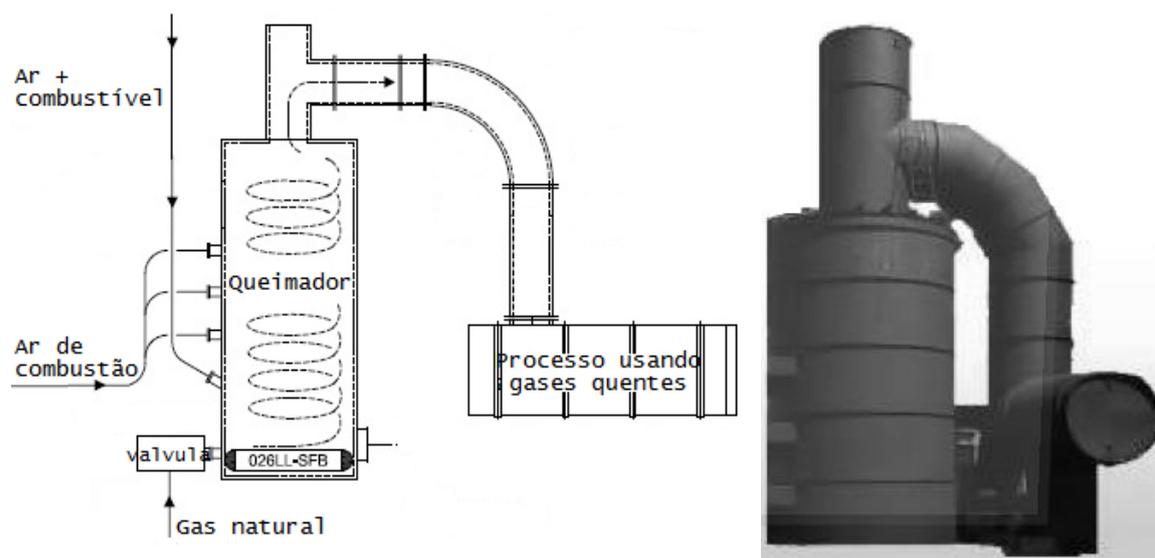
Fonte: Adaptado de Syred *et al.* (2004).

O combustor foi modelado em FLUENT em condições de pressão atmosférica. Foi utilizado o modelo de turbulência Reynolds stress (RMS) e um modelo de mistura fração/PDF para as espécies gasosas. O modelo de radiação DTRM foi incluído nos cálculos da equação da energia e o modelo DPM para a iteração das partículas com o meio fluido. Os resultados obtidos das simulações mostram que os perfis de velocidade e temperatura na

saída do combustor eram quase uniformes, garantindo condições estáveis para a entrada da turbina. No lado direito da Figura 2.11, na parte superior se mostra uma fotografia da chama rotacional dentro da câmara de combustão e na parte inferior se vê os contornos de velocidade da simulação em um plano transversal na entrada do combustor.

A corporação ONIX oferece uma série de combustores ciclônicos de diferentes potências térmicas (Series ONIX) para a combustão de combustíveis sólidos, principalmente madeira pulverizada. Segundo os fabricantes, esses queimadores ciclônicos oferecem uma alternativa de energia renovável com emissões limpas o suficiente para rivalizar com as emissões dos queimadores de gás natural. O sistema está desenhado para partículas de madeira que tenham as seguintes condições físicas: uma distribuição de tamanho normalizado com um tamanho de partícula máximo igual a 6,35 mm, um poder calorífico igual ou maior a 17445 kJ/kg, um teor de cinzas menor a 6%, teor de umidade menor a 10% e uma massa específica na faixa de 160,2–400,5 kg/m³. O combustível é pesado, pulverizado, fluidizado e fornecido pneumáticamente ao queimador. A Figura 2.12 mostra a configuração dos reatores ciclônicos ONIX. Esses sistemas de combustível sólido podem operar com vários materiais alternativos como: bagaço, *charcoal*, carvão, milho, chips de madeira seca, papel, serragem de madeira, termoplásticos, pó de madeira, entre outros.

Figura 2.12- Câmara ciclônica comercial da Série ONIX.



Fonte: Adaptado da Corporação ONIX.

A revisão bibliográfica sobre simulação numérica de câmaras ciclônicas realizada permitiu ter uma noção inicial de quais modelos de turbulência, radiação, combustão e

modelos para a fase particulada são mais apropriados e que podem ser utilizados na simulação da câmara de combustão em estudo.

2.5 Descrição da câmara de combustão ciclônica em estudo

A câmara ciclônica para a queima de biomassa que está sendo estudada possui um projeto que busca aproveitar o máximo possível da energia liberada na combustão de combustíveis sólidos pulverizados. Um esboço da câmara de combustão em estudo pode ser visto na Figura 1.3. A câmara de combustão está formada pelos seguintes componentes: um *swirler* estacionário, um tubo de alimentação de biomassa, um combustor e o revestimento externo. O combustor por sua vez, é formado por duas paredes, uma parede interna que envolve a zona de reação e uma parede externa concêntrica à interna que envolve o ar de resfriamento que escoava entre as duas paredes.

Um esquema da câmara de combustão ciclônica completa com as dimensões de cada uma das partes é mostrado na Figura 2.13. Além disso, na Tabela 2.1 são informados os dados de projeto da câmara de combustão e na Figura 1.2 observou-se dados dos estados termodinâmicos do ciclo completo EFGT. A continuação descreve-se cada uma dos componentes da câmara ciclônica.

Tabela 2.1- Dados de projeto do modelo da câmara de combustão ciclônica.

Parâmetro	Valor	Unidades
Eficiência do ciclo, η	24	%
Potência elétrica do ciclo, \dot{W}_e	900/4	kWe
Potência térmica do ciclo, \dot{W}_{th}	\dot{W}_e / η	kWt
Vazão mássica de ar de combustão, \dot{m}_{ar}	4,7/4	kg/s
Velocidade de entrada do ar, u_{ar}	$u_{ar} = \dot{m}_{ar} / \rho_{ar} A_{in}$	m/s
Temperatura do ar na entrada, T_{ar}	550	°C
Vazão mássica do ar transportador de comb. $\dot{m}_{ar,t}$	$0,20 * \dot{m}_{ar}$	kg/s
Velocidade de entrada do ar transportador, $u_{ar,t}$	$u_{ar,t} = \dot{m}_{ar,t} / \rho_{ar} A_{in}$	m/s
Temperatura do ar transportador de comb. $T_{ar,t}$	250	°C
Vazão mássica de combustível, $\dot{m}_{bagaço}$	$\dot{W}_{th} / PCI_{bagaço}$	kg/s
Velocidade de entrada do combustível, $u_{bagaço}$	10	m/s
Temperatura do bagaço, $T_{bagaço}$	50	°C
Temperatura dos gases de exaustão, T_g	1010	°C

Fonte: Documento “Turbina a gás de biomassa–Fase I: Teste de componente crítico. Estudos econômicos, planejamento e design” (2014).

Para a ignição do sistema, a câmara de combustão possui um queimador de gás que passa pelo interior do eixo do *swirler* e evapora por pequenos furos que apresenta a parte posterior do *hub* do *swirler*. Para as simulações não foram incluídos os furos no *swirler*, devido que precisar-se-ia de refinamento de células ao redor dos pequenos furos, aumentando a complexidade da malha. De qualquer forma, este fato não influencia nos resultados da simulação, devido que o sistema de ignição é independente e não é parte deste estudo.

2.5.2 Alimentação de biomassa

A forma como as partículas de biomassa são injetadas na zona de reação também é uma das características destacáveis desta câmara de combustão. Como pode ser visto na Figura 2.15 (a), neste sistema o tubo de alimentação de biomassa é concêntrica à zona de reação do combustor. A entrada de combustível está localizada na parte posterior da câmara de combustão. Desde a entrada até a zona de reação, as partículas de biomassa têm direção oposta aos gases de combustão gerados na câmara, onde trata-se portanto de um sistema de alimentação a contracorrente. No instante em que abandonam o tubo de alimentação, as partículas são arrastadas pelo ar primário, portanto a câmara de combustão define-se como um sistema horizontal co-corrente.

As partículas de biomassa são alimentadas desde a entrada do combustível com uma quantidade de ar equivalente a 20% da vazão mássica de ar primário. No início, as partículas de biomassa entram no tubo de alimentação à temperatura ambiente, enquanto as partículas se deslocam até o começo da zona de reação, as paredes do tubo de alimentação que já estão quentes devido às altas temperaturas que se geram na zona de combustão, transferem calor por radiação e convecção para as partículas. Portanto, as partículas experimentam processos de aquecimento e secagem durante este tempo de trajeto. Quando as partículas de biomassa chegam ao final do tubo de alimentação são arrastadas pelo ar quente e turbulento que vem da turbina e que passa pelo *swirler*.

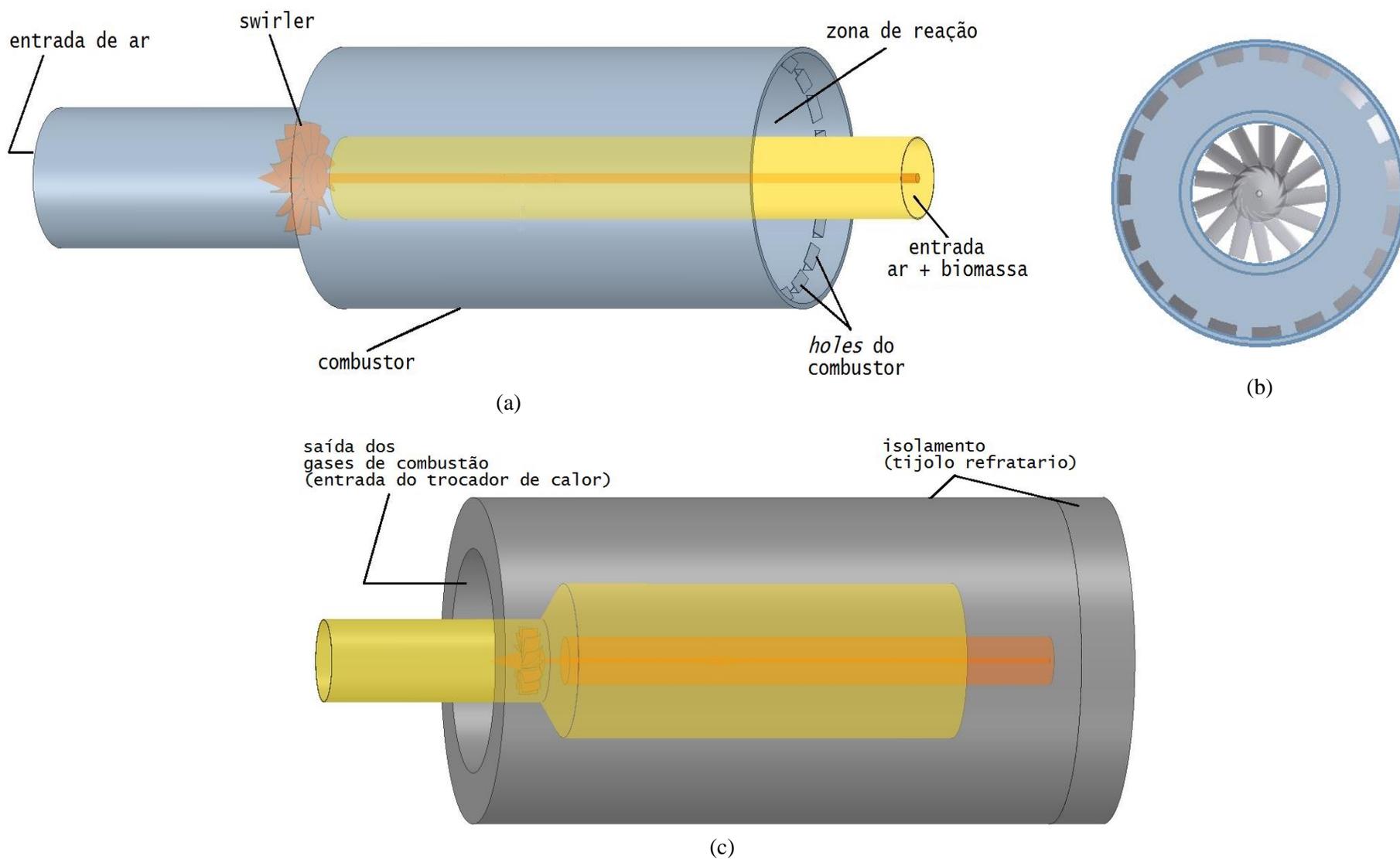
Nas dimensões atuais, a saída do tubo de alimentação de biomassa está posicionada a uma distância aproximada de 103 mm com relação ao corpo do *swirler* (a Figura 2.16 (a) mostra este detalhe), esta distância prevê o arrasto das partículas de biomassa na saída do tubo de alimentação e garante que o ar primário não entre no tubo de biomassa. O ponto em que as partículas entram na zona de combustão pode ser variável, com o fim de encontrar o

ponto indicado para liberar essas partículas e dar a elas o tempo de residência necessária dentro da câmara de combustão para garantir uma queima completa.

2.5.3 Combustor e zona de reação

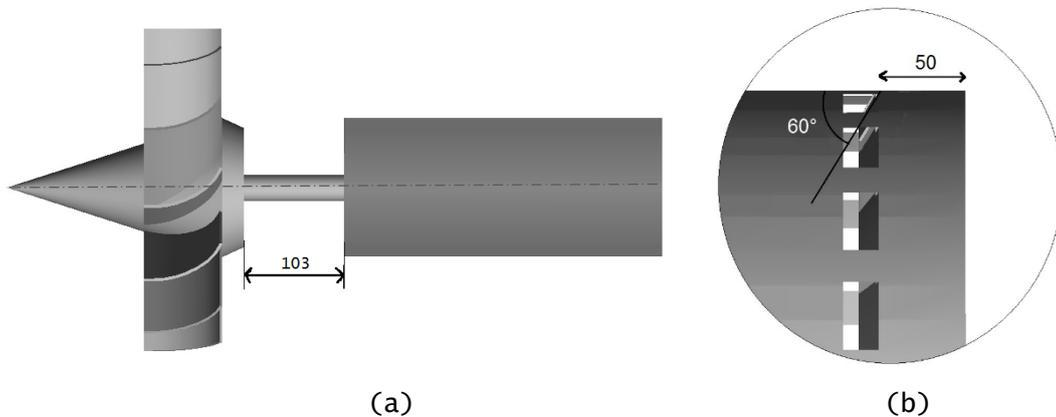
A parede interna do combustor que é concêntrica com o tubo de alimentação e que envolve a zona de reação, se estende até a entrada da câmara de combustão e acomoda o *swirler* na entrada dela. Na parte posterior, possui 19 orifícios (*holes*) de forma retangular e formam uma junção com a parede externa do combustor. Para dar forma aos orifícios, um corte é realizado no material da parede interna, e o extremo livre é dobrado para dentro da zona de reação com ângulo de 60 graus com a horizontal dando a forma de uma aleta, onde este detalhe pode ser visto na Figura 2.16 (b). Os orifícios permitem a entrada do ar de resfriamento da parede interna que escoar numa camada por cima dela entre a parede interna e externa. O ar de resfriamento tem o objetivo de resfriar a parede interna que é exposta a altas temperaturas geradas na zona de reação. Este ar que entra pelos orifícios é direcionado para o centro da zona de reação pela inclinação das aletas e ajuda (aporte de oxigênio) na combustão do *char* remanescente do processo de devolatilização das partículas de biomassa.

Figura 2.15- Partes da câmara de combustão ciclônica, (a) Combustor, (b) Vista frontal do combustor e (c) Câmara de combustão completa.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Figura 2.16- Detalhes importantes da geometria da câmara ciclônica (a) saída do tubo de biomassa com relação ao *swirler* (b) ângulo de inclinação da aleta e a distância com relação à parte posterior da câmara interna.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Na configuração atual da câmara de combustão (as dimensões com as que foram realizadas a geometria e a malha para as simulações) os orifícios se encontram a uma distância de 50 mm do fim da parede interna no extremo posterior, como é mostrado na Figura 2.16 (b). Tanto o valor do ângulo de inclinação dos orifícios como a distância do extremo posterior podem ser variáveis que podem ser modificados para melhorar o desempenho da combustão. Com relação ao ângulo de inclinação da aleta, pode ser necessário aumentar o valor do ângulo, e conseqüentemente com isto, a orientação do ar de resfriamento com relação à zona de reação. No tocante à distância das aberturas com relação ao extremo posterior da parede interna, pode ser necessário aumentar esta distância e aproximar mais estas aberturas ao centro da câmara, e conseqüentemente proporcionar maior quantidade de ar à zona de reação, com o fim de melhorar a quantidade de queima das partículas de biomassa (*burnout*) na câmara de combustão.

2.5.4 Parede externa

A parede externa é concêntrica com a parede interna e envolve o ar de resfriamento que flui entre as duas paredes. Também, a parede externa é mais prolongada que a entrada da parede interna e está conectada diretamente à saída da turbina. Esta entrada à câmara de combustão foi projetada para atuar como um difusor, com objetivo de reduzir a alta velocidade com que o ar deixa o último estágio da turbina axial. A relação de área entre a saída da turbina e o tubo de entrada da câmara é de $AR=2$ e tem 5 graus de divergência (o

detalhe do difusor não é mostrado nas figuras). No domínio para as simulações, a entrada da câmara de combustão começa depois do difusor.

2.5.5 Revestimento externo

O revestimento externo que isola todas as partes internas do meio ambiente está formada por duas camadas de tijolo refratário de alta temperatura com espessura de 63,5 mm (2,5 polegadas) cada camada, para evitar a perda de calor para o meio ambiente desde a zona de combustão. Detalhe de este revestimento externo é mostrado na Figura 2.15 (c).

Em resumo, este capítulo fez uma revisão bibliográfica completa sobre combustores ciclônicos. Com isto, entendeu-se melhor o funcionamento, as principais características construtivas, os fenômenos da fluidodinâmica, as vantagens oferecidas para a combustão, entre outros aspectos relacionados com este tipo de câmaras. Além disso, foi descrito a câmara de combustão em estudo, onde mostrou-se os principais componentes e as vantagens que pode oferecer para a combustão de biomassa. No próximo capítulo será descrito a combustão de combustíveis sólidos particulados em suspensão.

Capítulo 3

COMBUSTÃO DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS PARTICULADOS COM CFD

Processos complexos que precisam ser entendidos para desenvolver inúmeros dispositivos que transformem combustíveis sólidos renováveis em energia térmica é o conceito dado neste trabalho ao processo de combustão. Segundo Kangwanpongpan, (2013) os fatores que afetam significativamente as previsões numéricas em processos de combustão são as escolhas dos modelos de turbulência, os modelos de reação do *char* e seus parâmetros cinéticos, mecanismos de reação simplificado dos voláteis e seus parâmetros cinéticos, os modelos de combustão gasosa turbulenta e os modelos de radiação. Portanto, neste capítulo são estudados todos estes fatores mencionados, iniciando-se pelos diferentes sub-processos envolvidos no processo global de combustão como: secagem, pirólise ou devolatilização, reações homogêneas e reações heterogêneas de combustíveis sólidos. Para cada um desses sub-processos se escolhe um modelo numérico capaz de representá-lo adequadamente na simulação global da câmara de combustão. Já na segunda parte do capítulo são descritos os modelos de turbulência adequados para a modelagem de escoamentos rotacionais, e as justificativas das escolhas dos modelos de turbulência.

3.1 Considerações iniciais

A combustão de um combustível sólido pode ser descrita como a desintegração das células do combustível que ocorre quando é rapidamente aquecido. Determinados constituintes do interior da célula mudam de fase, passando de um gel para um vapor com um aumento tão rápido do volume, que a membrana da parede celular é incapaz de conter a pressão gerada e, assim quebra-se com a força explosiva espalhando os milhões de fibras de celulose que constituem a parede. Estas fibras, que de outro modo coalesceriam para formar

um carvão de queima lenta, são livres para reagir rapidamente com o ar no qual estão dispersas (JAMES, 2000).

Percebe-se então que a combustão se apresenta como um processo físico-químico complexo, que decorre de reações de oxidação química exotérmicas progressivamente auto-aceleradas e sustentadas por uma liberação de calor intensiva (YARIN, 2012). A combustão em geral requer três componentes: combustível, oxidante e calor. Quando estes três componentes estão disponíveis na proporção correta, a combustão é autossustentada, porque o combustível libera calor em excesso para iniciar a queima adicional (WILLIAMS *et al.* 2012).

Abordando então a combustão de combustíveis sólidos pulverizados, dependendo do tamanho das partículas combustíveis, a combustão ocorre através de sub-processos que acontecem em paralelo ou sequencialmente, incluindo aquecimento e secagem, pirolise ou devolatilização, combustão de voláteis com formação do *char* e combustão do carvão propriamente (MEHRABIAN *et al.* 2012; NUNES *et al.* 2014; BARSALI *et al.* 2015). A espessura térmica de uma partícula combustível sólida é calculada a partir do número de Biot. Partículas que apresentam gradientes de temperatura desenvolvidos e progresso simultâneo de diferentes etapas da conversão, chamam-se de partículas termicamente espessas (*thick thermally particles*). E as chamadas partículas termicamente finas (*thin thermally particles*) não apresentam gradientes de temperaturas dentro delas e as etapas da conversão acontecem sequencialmente (MEHRABIAN *et al.* 2012).

O processo de secagem ocorre a baixas temperaturas até 100 °C. Se o conteúdo de umidade for muito elevado, o processo de combustão não pode ocorrer de forma rápida e constante (NUNES *et al.* 2014). Já durante a devolatilização, os gases liberados pelo combustível são compostos principalmente de H₂O, CO, CO₂, CH₄ e H₂. Nesta fase de devolatilização existe encolhimento das partículas e um aumento na sua porosidade. A composição e a quantidade de voláteis liberados nesta fase são influenciadas principalmente pela taxa de aquecimento da partícula, pela temperatura final, pela composição do combustível e também pelo tamanho das partículas (NUNES *et al.* 2014). Após a devolatilização o produto residual é o *char*. Finalmente, a combustão heterogênea ou combustão do *char* é a reação do carvão com o oxigênio e fornece como produto CO nas gaseificações e CO₂ na combustão completa. A fração de CO e CO₂ produzida durante a

combustão do *char* dependem principalmente da temperatura de combustão, mas também do excesso de oxigênio.

A compreensão de todos aqueles sub-processos mencionados anteriormente é essencial para o projeto e otimização de sistemas de combustão, como caldeiras, combustores, queimadores e fornalhas. Muitas vezes, esta compreensão requer de investigações profundas por meios experimentais ou estudos por simulação e modelagem computacional. Em muitos casos, a pesquisa experimental em escala real é extremamente custosa e as alternativas são experiências em escala de laboratório.

No caso de estudos por simulações numéricas, as técnicas de CFD têm-se tornado ferramentas eficientes na busca de um melhor entendimento dos fenômenos que ocorrem na conversão térmica de biomassa. Estas ferramentas podem ser capazes de fornecer uma análise detalhada da parte da fluidodinâmica na câmara de combustão, e também as principais reações químicas em relação às espécies gasosas envolvidas no processo de combustão (BARSALI *et al.* 2015). Sabe-se também que a modelagem da combustão de biomassa é mais complexa que a modelagem dos combustíveis gasosos ou líquidos em combustores, devido à complexidade das reações heterogêneas no leito, reações em escoamentos turbulentos na zona de mistura e as relações muito intensivas entre elas (COLLAZO *et al.* 2012).

Pelo fato de que os códigos CFD foram originalmente desenvolvidos para trabalhar com fluidos, a modelagem do início do processo quando o combustível se encontra na fase sólida, tem sido um desafio para muitos pesquisadores. Para isto, numerosos trabalhos têm proposto uma grande variedade de estratégias para programar submodelos da parte sólida, e acoplá-los com os códigos CFD comerciais para conseguir uma simulação completa de um sistema de combustão (GÓMEZ *et al.* 2015). Geralmente são realizadas rotinas ou subprogramas na linguagem de programação C++ e compilados na plataforma do CFD para o acoplamento com a fase gasosa no momento da simulação. No software comercial ANSYS FLUENT estes subprogramas são conhecidos como Funções Definidas pelo Usuário UDF's (BARSALI *et al.* 2015).

Atualmente muitos trabalhos de pesquisa já desenvolveram modelos para estudar o comportamento da fase particulada de combustíveis de biomassa sólida, sendo que alguns desses trabalhos estudaram a combustão de uma simples partícula (MEHRABIAN *et al.* 2012; STROM e THUNMAN, 2013; GOMEZ *et al.* 2015) descrevem detalhadamente os

processos sequenciais que acontecem na combustão e a complexidade do processo. Já outros trabalhos estudaram um leito inteiro de partículas de biomassa (YANG *et al.* 2007; WUNZENBERGER *et al.* 2002; PORTEIRO *et al.* 2009; GOMEZ *et al.* 2014) que é mais complexo ainda. Diferentes tipos de biomassa foram estudados nesses trabalhos, como por exemplo, *pellets* de madeira, cascas de arroz, palha de trigo, carvão, entre outros.

A abordagem utilizada em um estudo de combustão de combustíveis sólidos também é um fator importante a ser considerado na hora de definir as hipóteses do estudo. Pode-se aplicar um método Euleriano para fase gasosa e um método Euleriano para a fase sólida, denominada abordagem *Euleriano-Euleriano*. Outra abordagem é chamada *Euleriano-Lagrangiano*, que aplica o método Euleriano à fase gasosa ou meio contínuo e, o método Lagrangiano à fase das partículas ou fase discreta. Esta última abordagem requer um esforço computacional maior por realizar um seguimento a cada uma das partículas do leito, para descrever o comportamento delas.

Outra escolha muito importante a ser realizada na hora de definir os parâmetros para a simulação do sistema é a quantidade de graus de liberdade. Alguns trabalhos utilizam um modelo de domínio compacto e descrevem a combustão através de uma abordagem unidimensional, bidimensional ou ainda com domínio tridimensionais (COLLAZO *et al.* 2012). Embora ao observar a combustão em um combustor de leito fluidizado, arrastado ou ciclônico, é evidente que o processo tem lugar em mais de uma dimensão e que isto afeta a conversão de maneira significativa (HERMANSSON e THUNMAN, 2011).

3.2 Escoamentos gás-partículas

3.2.1 Carregamento de partículas e número de Stokes

Em uma mistura heterogênea de duas ou mais fases, os constituintes possuem propriedades físicas distintas, e em geral se movimentam com velocidades diferentes. Os constituintes de um escoamento de mistura heterogênea, por exemplo, partículas combustíveis de biomassa suspensas em ar quente, sempre trocam quantidade de movimento linear e angular, massa e também energia (MICHAELIDES, 2013; GELDART, 1973).

Uma primeira classificação que se pode fazer em escoamentos gás-partículas está relacionada à fração ocupada pelas partículas no volume fluido em uma mistura de partículas e fluido, isto dá uma definição de escoamentos densos ou diluídos. Escoamentos diluídos ocorrem quando as partículas ocupam menos que 2% do volume total do escoamento, e

escoamentos densos ocorrem em geral em concentrações de partículas maiores a 6,5%. Colisões interpartículas e interações de partículas com as paredes do dispositivo devem ser levadas em conta em escoamentos densos, enquanto os dois fenômenos podem ser negligenciados em escoamentos diluídos sem perda significativa de precisão (MICHAELIDES, 2013). Um valor intermediário entre 2% e 6,5% leva a escolher a aplicação de um esquema numérico que considera as interações interpartículas, caso deseje-se alcançar um elevado grau de precisão nos resultados.

A maioria dos escoamentos entre gás-partículas que são encontrados em sistemas de engenharia são de natureza turbulenta. O conceito de carregamento de partículas ou carregamento de massa geralmente é usado para caracterizar o escoamento gás-partículas. Por definição, carregamento de massa (ML) é:

$$ML = \frac{m_p}{m_g} \quad (3.1)$$

Os subscritos p e g fazem referência à partícula e gás, respectivamente. Quando esta relação é pequena as partículas podem ser tratadas como “contaminantes” passivos. Modificação na turbulência do fluido transportador pode ser esperada para ser desprezível, se o diâmetro da partícula é muito menor que a escala Kolmogorov. No entanto, quando a relação ML é grande, modificações à turbulência global podem ser induzidas. Se o diâmetro da partícula é maior que a escala Kolmogorov, a partícula afeta a energia do gás transportador. Já para relações de ML suficientemente grandes, a existência de movimento relativo entre partículas e o fluido em movimento leva a uma dissipação extra da energia turbulenta.

Outro critério que relaciona o número de Reynolds da partícula, Re_p , declara que valores elevado deste número de Reynolds tende a gerar ondas turbulentas, que subsequentemente modificarão a turbulência do fluido transportador. Um número adimensional importante para definir o comportamento aerodinâmico das partículas é número de Stokes, St :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_s} = \frac{\text{tempo de resposta da partícula}}{\text{tempo de resposta do sistema}} \quad (3.2)$$

Onde $\tau_p = \rho_p d_p^2 / 18\mu_c$ e $\tau_s = L_s / v_s$, sendo L_s a longitude característica e v_s a velocidade característica do sistema. Em ANSYS FLUENT, o número de Stokes permite avaliar qual modelo deve ser aplicado ao tratamento da fase discreta. Se o número $St \ll 1$ ou $St \cong 1$, a

fase discreta pode ser representado pelos modelos de Mistura ou Euleriano. Com isso, as partículas podem ser consideradas por estarem próximas à velocidade de equilíbrio com o fluido transportador. Nesse caso pode-se estudar o problema com uma abordagem de acoplamento de uma-via (*one-way*).

Para números de $St \gg 1$, as partículas se movimentam independentemente do escoamento e podem ser usados os modelos de fase discreta DPM e DPM *Dense*, que é uma abordagem híbrida entre Euler-Euler e Euler-Lagrange. Portanto, as partículas não estão em equilíbrio com a fase fluida circundante e se desviam de maneira significativa da via do escoamento do fluido, o que leva a uma transferência de quantidade de movimento significativa desde a partícula ao fluido. Sendo assim, o problema deve ser estudado com o acoplamento de duas-vias (*two-way*). Tipicamente, no acoplamento de duas-vias os efeitos das partículas na velocidade e temperatura do fluido transportador são modelados como termos fonte nas equações de massa, quantidade de movimento e energia. O movimento das partículas individuais ou grupos de partículas podem ser modelados com uma abordagem Lagrangiana (MICHAELIDES, 2013).

A importância da interação partícula-partícula dá uma classificação separada dos fluidos quando a densidade do número de partículas é suficientemente grande. Portanto, deve-se considerar um acoplamento de quatro-vias (*four-way*). A modelagem de colisões interpartículas é o quarto elemento que caracteriza o acoplamento de quatro-vias, e é tipicamente associado a escoamentos densos. Em um acoplamento de quatro-vias, o fluido transportador influencia o movimento e a transferência de calor das partículas, e as partículas afetam a velocidade e a temperatura desse fluido. Além disso, a modelagem leva em consideração as interações fluidodinâmicas entre as partículas, colisões entre partículas e colisões entre partículas e paredes (MICHAELIDES, 2013).

3.2.2 Regime de fluidização

O número de Arquimedes, Ar , que é uma medida da relação entre a gravidade/flutuabilidade e as forças viscosas nas partículas, desempenha um papel importante no processo de fluidização e governa a classificação das partículas:

$$Ar = \frac{8g\rho_f(\rho_s - \rho_f)\alpha^3}{\mu_s^2} \quad (3.3)$$

Muitas vezes quando se projeta um reator, seja este de qualquer tipo, o projetista do sistema tem que se adequar as características das partículas que entrarão no leito, por conta de que os sistemas são projetados em base ao material combustível disponível. Em tais casos, o projeto dos padrões de escoamento dos reatores devem ser adequados na construção do sistema para os tipos de partículas a serem usadas.

Geldart (1973) estudou as características de fluidização de partículas no ar e sugeriu as seguintes quatro categorias de partículas:

1. *Partículas coesivas* (C) com tamanhos muito pequenos que exibem fortes forças interpartículas, e por isso formam aglomerados e agregados. Partículas coesivas fluem mal.
2. *Partículas aeráveis* (A) em geral têm tamanhos maiores e exibem forças interpartículas mais fracas. Eles fluidizam rapidamente, exibem alta mistura em um estado fluidizado e desareiam lentamente quando o escoamento é interrompido. Materiais sólidos aeráveis são os materiais mais adequados para leitos fluidizados.
3. *Bolhas* (B) são partículas de tamanhos maiores com forças interpartículas fracas. Eles se misturam relativamente bem no estado fluidizado.
4. *Partículas inerciais* (D) têm forças interpartículas desprezíveis e inércia dominante. Eles fluidizam rapidamente em velocidades mais altas, mas sua mistura no estado de fluidização é ruim devido ao seu tamanho maior.

3.2.3 Modelos multifásicos para escoamentos gás-partícula

O método de partículas discretas (DPM), desenvolvido por Peters (2003), é uma ferramenta numérica que lida com o movimento e a conversão termoquímica do material particulado. Em contraste com uma abordagem contínua que calcula a média de um conjunto de partículas no espaço, o DPM considera uma partícula sólida como uma entidade individual com a conversão e movimento anteriormente mencionado.

Para descrever o movimento das partículas pode-se usar também o método clássico Método de Elementos Discretos (DEM), onde os movimentos das partículas individuais são descritos pela Segunda Lei de movimento de Newton, que calcula o movimento translacional e rotacional. O acoplamento entre a fase contínua e fase discreta é chamada de "CFD-DEM" ou Modelo Contínuo e Discreto Combinado (CCDM). Quando o método é comparado com

os métodos anteriores, o DEM pode simular microscopicamente o escoamento de partículas, mas o método é extremamente custoso em termos computacionais.

Recentemente, com o intuito de realizar simulações mais realistas do movimento das partículas no meio fluido, muitos pesquisadores (MAHMOUDI *et al.* 2014; MAHMOUDI, 2015; MEHRABIAN *et al.* 2012) tem optado pelo uso do Método de Elementos Discretos Estendido (XDEM), que é um marco de simulação multifásica e numérica avançada, na qual a dinâmica de material granular ou partículas é descrita pelo método de elementos discretos clássicos (DEM), e é estendida para propriedades adicionais como o estado termodinâmico, tensão/deformação ou campo eletromagnético para cada partícula. Além disso, o conceito XDEM abrange o acoplamento entre fases discretas e contínuas simultaneamente. Porém, este método demanda um elevado custo computacional.

3.3 Modelagem da conversão termoquímica das partículas de biomassa e da fluidodinâmica da câmara de combustão ciclônica

O modelo numérico apresentado neste trabalho foi baseado em algumas referências bibliográficas que auxiliaram à estruturação deste capítulo. Os trabalhos de investigação escolhidos para derivar um modelo adequado para a aplicação no combustor ciclônico foi o trabalho de Toporov (2014), que realizou testes experimentais e simulações numéricas da queima de carvão pulverizado em atmosferas de O₂ e CO₂ em um queimador de 100 kW, mostrado na Figura 2.7 (a). O material de suporte de ANSYS FLUENT 17 também foi bastante consultado na hora de escolher os modelos para a modelagem da conversão termoquímica das partículas combustíveis. Outro trabalho utilizado para complementar algumas das teorias adotadas nesta tese foi a tese de doutorado de Shiozawa (2013) que realizou um estudo em CFD da combustão de carvão e biomassa em altos-fornos.

Nas seguintes seções apresenta-se o conjunto de equações para modelar tanto a fluidodinâmica do leito descritas pelas equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies, assim como os processos que experimentam as partículas de biomassa como a secagem, devolatilização, gaseificação e combustão. A trajetória de cada partícula também é de interesse, e portanto é modelada com uma abordagem Lagrangiana.

3.3.1 Modelagem da conversão termoquímica das partículas combustíveis

Nesta seção descreve-se os modelos mais representativos e os modelos escolhidos de cada um dos sub-processos que as partículas combustíveis experimentam durante a combustão.

3.3.1.1 Secagem

A água em uma partícula de carvão ou de biomassa se encontra em três formas ou estados físicos: água líquida também chamada de água livre, água confinada e vapor de água. A água líquida livre flui nas cavidades porosas das células e é retida por forças capilares. A água confinada está contida nas paredes das células, por meio de pontes de hidrogênio, e o vapor de água nas cavidades das células está em equilíbrio termodinâmico com a água livre (MEHRABIAN, 2013). A secagem natural ocorre por difusão do vapor de água para fora da partícula. Como há um equilíbrio termodinâmico entre o vapor de água e a água livre, parte da água livre evapora para compensar a perda do vapor de água. Quando a água líquida sai, a água confinada começa a evaporar (MAHMOUDI, 2015).

A parte mais importante de um modelo de secagem é calcular a taxa de evaporação da água. Geralmente, os modelos de secagem mais comuns são categorizados da seguinte forma: modelo dissipador de calor, taxa de evaporação cinética de primeira ordem e modelo de equilíbrio (MAHMOUDI, *et al.* 2014). O modelo dissipador de calor ou modelo de evaporação constante baseia-se na hipótese de que a secagem ocorre à temperatura de ebulição fixa (373,15 K). Nesta abordagem, o calor disponível acima da temperatura de ebulição é consumido por evaporação sem distinção entre água livre e confinada. Neste modelo não há resistência à transferência de massa para o vapor de água que sai instantaneamente da partícula. Estudos acerca de este modelo de secagem foram realizados por (COLLAZO *et al.* 2012; PETERS *et al.* 2002).

O modelo cinético de primeira ordem é uma reação heterogênea de acordo com a equação de Arrhenius para a água livre e confinada. Nesta abordagem a água evapora abaixo da temperatura de evaporação. No entanto, é difícil aplicar a cinética dada a condições diferentes daquelas em que os dados foram obtidos. Alguns autores que estudaram este modelo de secagem foram BENKOUSSAS *et al.* 2007; e PETERS *et al.* 2002.

Por sua vez, o modelo de equilíbrio está baseado na hipótese que a água livre e confinada está em equilíbrio com o vapor de água local (nos poros da partícula). Assim, a pressão parcial do vapor de água é fixada pela pressão de saturação (WURZENBERGER,

2002). A taxa de secagem é proporcional à diferença entre a concentração de equilíbrio e a concentração de vapor real na fase gasosa. Um aumento na temperatura aumenta a pressão de saturação dentro da partícula. Portanto, mais água deve ser evaporada para atingir a pressão de saturação. A aplicação deste modelo é usual em modelos de secagem a baixas temperaturas (MEHRABIAN *et al.* 2012). Os modelos de equilíbrio dependem da transferência de calor e massa dentro dos poros da partícula de biomassa.

Entende-se que a água contida nas partículas de biomassa pode evaporar a baixas temperaturas, desde que a $p_{sat_{liq}} > p_{vap_{gas}}$. Então, neste estudo o modelo de equilíbrio é escolhido para calcular a taxa de evaporação, o qual é dado pelo fluxo molar de vapor definido pela Eq. (3.4).

$$N_i = k_c(C_{i,s} - C_{i,\infty}) \quad (3.4)$$

Onde k_c , $C_{i,s}$ e $C_{i,\infty}$ são o coeficiente de transferência de massa, a concentração do vapor de água na superfície da partícula e a concentração do vapor de água no gás circundante, respectivamente. As concentrações do vapor da água nas partículas e no gás são dadas pelas Eqs. (3.5) e (3.6).

$$C_{i,s} = \frac{p_{sat}(T_p)}{RT_p} \quad (3.5)$$

$$C_{i,\infty} = X_i \frac{p}{RT_\infty} \quad (3.6)$$

Onde $p_{sat}(T_p)$ é a pressão de saturação da água em função da temperatura da partícula e p é a pressão do vapor da água no meio contínuo. O software ANSYS FLUENT oferece dois modelos para a modelagem da evaporação da água das partículas combustíveis. O modelo de difusão controlada para taxas de vaporização baixas e o modelo de convecção/difusão controlada para elevadas taxas de vaporização. O modelo de difusão controlada segue a abordagem do modelo de equilíbrio descrito anteriormente e é governada pela Eq. (3.4). Portanto, o modelo de difusão controlada foi configurada no software FLUENT nas simulações deste estudo.

Pode acontecer também evaporação da água por ebulição, e neste caso acontece quando as partículas sólidas não perderam toda a água durante a evaporação e ao entrar em contato com os gases quentes a altas temperaturas, eles rapidamente alcançam temperaturas maiores a da ebulição (373,15 K). Então, experimenta-se perda de água por ebulição, porque

a estrutura da partícula é o *char* sólido. ANSYS FLUENT utiliza a Eq. (3.7) para calcular a taxa de ebulição quando a partícula alcança a temperatura de ebulição.

$$\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{2}{\rho_p h_{fg}} \left[\frac{2k_\infty [1+0,23\sqrt{Re_d}]}{d_p} (T_\infty - T_p) + \varepsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \right] \quad (3.7)$$

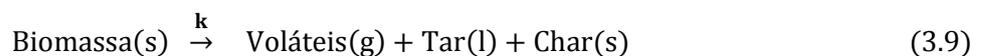
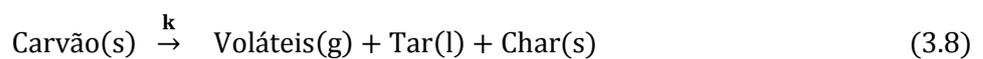
Onde h_{fg} é o calor latente e k_∞ é a condutividade térmica do gás, nota-se que o modelo requer que o modelo de radiação esteja ativo.

3.3.1.2 Devolatilização

Uma vez que as partículas sólidas de combustível perderam a umidade e encontram-se a uma temperatura mais elevada, começa a devolatilização, caracterizada pela liberação dos chamados "voláteis" ou "gases combustíveis", assim como o alcatrão (líquido) e o *char* (sólido) (SHIOZAWA, 2013).

Na devolatilização grandes cadeias de hidrocarbonetos são quebradas em cadeias mais curtas, algumas das quais podem se quebrar novamente para formar hidrocarbonetos menores (reações secundárias) (MEHRABIAN, 2013). Durante estas reações, as espécies de gases e alcatrão deixam a estrutura sólida da partícula, deixando uma estrutura do carvão muito porosa. Em partículas de biomassa, a matéria volátil (gás e alcatrão) compreende a maior parte da massa da partícula.

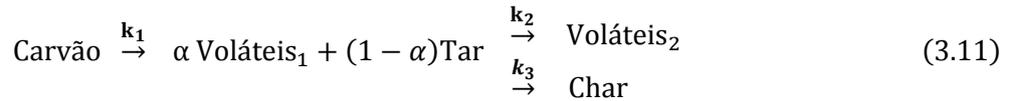
Vários modelos cinéticos de reações são indicados na literatura. Uma revisão completa do processo de devolatilização é dada por DI BLASI (2008). Os modelos cinéticos podem ser categorizados em três grupos: reação global de um passo, modelo de duas reações concorrentes e o modelo de devolatilização de três componentes principais de biomassa (celulose, hemicelulose e lignina). O modelo de reação global de um passo é o mais simples, e considera a decomposição de biomassa em carvão, gás e alcatrão, de acordo com a Eq. (3.8) e Eq. (3.9). Neste modelo a taxa de decomposição é proporcional ao conteúdo de material volátil (VM).



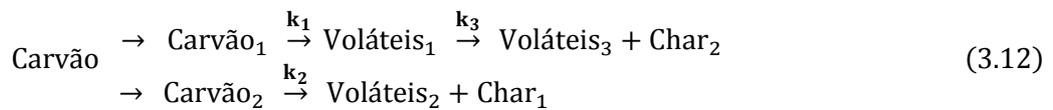
A taxa constante é expressa na forma de Arrhenius Eq. (3.10), onde a temperatura da partícula de biomassa é assumida de modo uniforme.

$$k = A \exp\left(-\frac{T_A}{T_P}\right) = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT_P}\right) \quad (3.10)$$

O modelo de reação competitivo consecutivo, Eq. (3.11), proposto por Niksa *et al.* (1984) sugere um processo primário de devolatilização para converter o material em gases voláteis estáveis e reativos intermediários ou alcatrão, com rendimento proporcional ao coeficiente estequiométrico α . O alcatrão subsequentemente se particiona em *char* e voláteis adicionais. As taxas de reação foram calculadas na forma de Arrhenius Eq. (3.11).



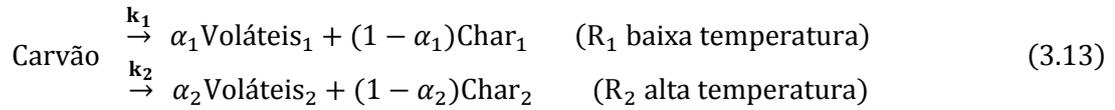
O modelo de reações consecutivas paralelas Eq. (3.12) proposto por Nsakala *et al.* (1977) assume que o carvão se decompõe em dois componentes distintos. O componente 1 transforma o carvão em gás unicamente, e posteriormente este gás se decompõe através de um craqueamento secundário para formar *char*. O componente 2 transforma o carvão em volátil e carvão na fase inicial.



Estudos anteriores sobre o processo de devolatilização foram realizados a temperaturas inferiores a 1300 K e taxas de aquecimento inferiores a 10^3 K/s (SHIOZAWA, 2013). No entanto, em processos industriais por exemplo, utilizando a tecnologia PCI com injeção de carvão pulverizado, o carvão é aquecido a uma temperatura superior a 2000 K com uma taxa de aquecimento de 10^6 K/s. Estudos experimentais (BADZIOCH e HAWKSLEY, 1970; KOBAYASHI *et al.* 1977; UBHAYAKAR *et al.* 1976) conduzidos a altas temperaturas com condições de aquecimento rápido, mostram uma maior produção de gases combustíveis durante o processo de devolatilização, e portanto os modelos acima mencionados são inadequados para representar o processo de devolatilização em um estudo.

Atualmente, o modelo de duas reações concorrentes é amplamente utilizado. Este modelo dado pela Eq. (3.13) foi proposto por Ubhayakar *et al.* (1976) e Kobayashi *et al.* (1977). O modelo introduz a segunda reação para melhorar a produção dos gases combustíveis em alta temperatura, controlando os parâmetros da taxa de reação e o rendimento volátil. Para temperaturas baixas da partícula, a primeira reação com uma produção volátil α_1 é dominante, mas à medida que a temperatura aumenta o processo

começa a mudar para a segunda reação, que tem uma maior produção volátil α_2 . Como resultado, a produção final do gás combustível pode ser alterada dependendo da temperatura.

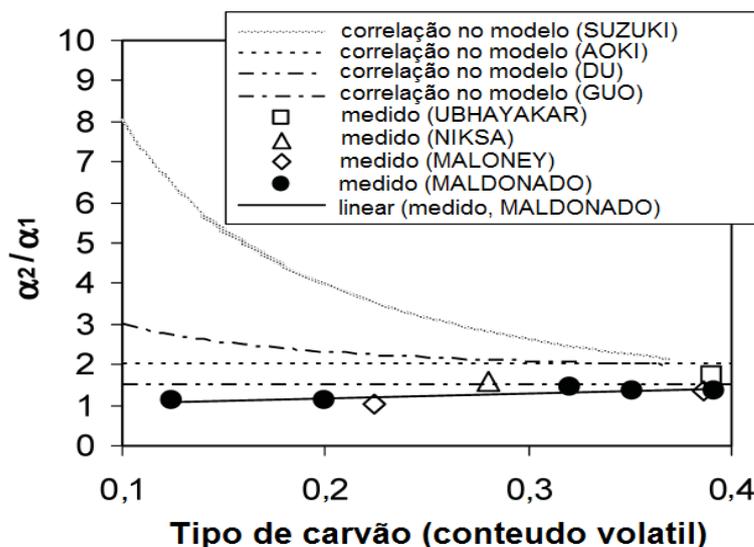


O modelo considera duas reações (R_1 e R_2) com diferentes taxas de reação (k_1 e k_2) e produção volátil (α_1 e α_2). As constantes das taxas (k_i) são expressas na forma de Arrhenius Eq. (3.10).

Os rendimentos voláteis (α_1 e α_2) foram tratados diferentemente por diversos pesquisadores. Por exemplo, Ubhayakar *et al.* (1976) considerou o rendimento volátil mais baixo α_1 igual ao conteúdo de matéria volátil do carvão baseado na análise imediata (em base *daf*), e o rendimento volátil mais elevado α_2 como o dobro do conteúdo de matéria volátil do material (ou seja, $\alpha_1 = \text{VM}$, $\alpha_2 = 2\text{VM}$). Por outro lado, Kobayashi *et al.* (1977) consideraram α_1 e α_2 como constantes ($\alpha_1 = 0,3$ e $\alpha_2 = 1$).

Assumir a produção volátil a baixa temperatura como sendo igual ao conteúdo VM do combustível foi concordada por muitos pesquisadores, mas a alta produção volátil α_2 ainda não foi determinada. Em muitos estudos α_2 é tratado relacionando-o com α_1 de várias formas (vide Figura 3.1), em geral o denominado “fator-Q” é usado para representar o aumento do rendimento volátil em alta temperatura.

Figura 3.1- Correlações entre α_1 e α_2 segundo diferentes pesquisadores.



Fonte: Adaptado de Shiozawa, (2013).

Entende-se que melhores resultados são obtidos usando o modelo de devolatilização de Kobayashi *et al.* (1977) de duas reações concorrentes e a relação linear obtida por Maldonado *et al.* (2006) para o fator-Q, portanto este modelo é usado neste estudo.

Em ANSYS FLUENT a modelagem da devolatilização usando o modelo de duas reações concorrentes (Kobayashi) é descrita pela Eq. (3.14), onde R_1 e R_2 são as taxas concorrentes que podem controlar a produção volátil em diferentes faixas de temperaturas. As duas taxas cinéticas podem ser calculadas com a Eq. (3.10) de Arrhenius.

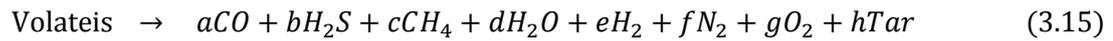
$$\frac{m_v(t)}{(1 - f_{w,0})m_{p,0} - m_a} = \int_0^t (\alpha_1 R_1 + \alpha_2 R_2) \exp\left(-\int_0^t (R_1 + R_2) dt\right) dt \quad (3.14)$$

Onde $m_v(t)$ é a produção volátil para um dado tempo t , $m_{p,0}$ e m_a são a massa inicial da partícula na injeção e a massa de cinzas na partícula, respectivamente. O modelo de duas reações concorrentes em ANSYS FLUENT requer a entrada de parâmetros das taxas cinéticas como são os fatores pré exponenciais A_1 e A_2 , as energias de ativação E_1 e E_2 e os fatores de produção voláteis α_1 e α_2 do material combustível que está sendo estudado.

a. Predição da composição das espécies voláteis

A composição dos voláteis a partir de combustíveis sólidos geralmente é difícil de determinar com precisão, porque está fortemente relacionada ao tipo de combustível (biomassa ou carvão), as condições operacionais e ao histórico de temperatura que as partículas sólidas experimentam. Vários métodos (SYAMLAL e BISSETT, 1992; MA e ZITNEY, 2012; THUNMAN *et al.* 2001; NAKOD, 2013) foram propostos para tentar prever a composição de voláteis na combustão e gaseificação de combustíveis sólidos.

Segundo o método *Volatile Break-up Approach* proposto por Nakod (2013) os componentes voláteis no carvão ou qualquer outro combustível sólido são conhecidos em termos de frações mássicas de elementos como C, H, O, N, S. No entanto, quando se desenvolvem simulações numéricas, equações de transporte das espécies gasosas são resolvidas. Portanto, as frações mássicas conhecidas dos elementos individuais nos voláteis precisa ser convertida a frações mássicas de espécies como CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O, H₂S, N₂ e O₂. Após obter as frações mássicas das espécies gasosas utilizando a abordagem *volatile break-up* de Nakod (2013) e os pesos moleculares das espécies gasosas, os coeficientes estequiométricos a, b, c, d, e, f, g, h da Eq. (3.15) podem ser calculados.



O poder calorífico das espécies *Voláteis* é calculado convertendo primeiro o poder calorífico como recebido do carvão a seu poder calorífico inferior, e logo subtraindo o poder calorífico inferior do carbono fixo (coque) dele. O calor latente do vapor de água formado desde o conteúdo de umidade e o hidrogênio é considerado apropriadamente, enquanto se converte o poder calorífico como recebido do combustível a seu poder calorífico inferior.

Por outro lado, segundo Ma e Zitney (2012) desde que as reações de fase gasosa são modeladas e as espécies H_2 , O_2 , H_2O , CO , e CO_2 são tanto reagentes como produtos dessas reações, foi descoberto que as porcentagens ou divisões que um usuário especifica na configuração de essas reações não afetam significativamente a composição dos gases (*syngas*) previstos.

Da mesma forma, Ma e Zitney (2012) descrevem um procedimento para prever a composição dos voláteis. Segundo eles, se assume que dos 6 elementos (C, H, O, N, S e Cl) da composição do combustível (base *daf*), o processo de devolatilização liberará totalmente todos os elementos da partícula, exceto o C, o qual é o único elemento orgânico que permanece no *char*, embora outros elementos como S e N também são encontrados no *char*, mas usualmente em pequenas frações de massa. Portanto, considerar a composição do carvão como sendo unicamente de carbono, não causa erro significativo na composição dos voláteis. Logo, dos 6 elementos que são liberados na fase gasosa durante a devolatilização, N é convertido a N_2 molecular. Acredita-se que NO, HCN e NH_3 são outros possíveis produtos que contem nitrogênio na devolatilização de combustíveis sólidos.

Se assume que Cl se combina com H para formar HCl. Da mesma forma, S é improvável para formar SO_2 . Então assume-se que combine com H para formar H_2S . Depois que os elementos N, Cl e S formaram suas correspondentes espécies moleculares, os elementos restantes são C, H e O. As principais possíveis espécies para serem formadas são H_2 , O_2 , H_2O , CO , CO_2 e hidrocarbonetos. H e O podem formar H_2 , O_2 ou H_2O sem a participação de C. O, processo permite especificar uma porcentagem de O remanescente para formar O_2 , e certa porcentagem de H remanescente para formar H_2O . Depois disso, o oxigênio remanescente combina com o C para formar CO ou CO_2 . Da mesma forma, é permitido ao usuário especificar a divisão entre CO e CO_2 .

Depois que H e O se esgotaram, os elementos remanescentes unicamente são C e H. Por simplicidade, os hidrocarbonos se limitam a CH₄ e C₆H₆. Note que a relação H a C no CH₄ é de 4 e de 1 em C₆H₆ e eles representam as fronteiras máxima e mínima da relação molar para os hidrocarbonetos encontrados no *syngas* produzido. Se CH₄ é o único hidrocarboneto modelado, existirá alguns resíduos de C que não se possa combinar com nenhum outro elemento. Portanto, o carbono residual deve ser atribuído ao *char* e o rendimento volátil deve ser limitado.

As propriedades das 10 espécies (H₂, O₂, N₂, CO₂, CO, H₂O, CH₄, C₆H₆, H₂S, HCl) dos voláteis do carvão ou biomassa estão disponíveis no solver ANSYS FLUENT.

b. Encolhimento das partículas durante a devolatilização

Partículas sólidas perdem massa nos processos de secagem, devolatilização, combustão e gasificação. Baseados na análise morfológica, inicialmente no processo de devolatilização a partícula combustível pode sofrer inchamento e depois encolhimento no seu diâmetro. Isto depende da composição química do combustível e das condições do gás circundante. Na biomassa, devido ao elevado conteúdo volátil o diâmetro da partícula pode mudar durante a devolatilização dependendo do coeficiente de inchamento (*swelling*) o qual é calculado com a Eq. (3.16):

$$\frac{d_p(t)}{d_{p,0}} = 1 + (C_{sw} - 1) \frac{(1 - f_{w,0})m_{p,0} - m_p}{f_{v,0}(1 - f_{w,0})m_{p,0}} \quad (3.16)$$

O segundo termo do lado direito da Eq. (3.16) representa a massa que foi devolatilizada com relação à massa inicial da partícula. O termo C_{sw} é chamado de coeficiente de inchamento, e está baseado na composição química e conteúdo volátil da biomassa. É calculado em base ao diâmetro médio da partícula antes e depois do processo de devolatilização para diferentes temperaturas (ANSYS FLUENT, 2017).

3.3.1.3 Combustão do *char*

O *char* remanescente da devolatilização tem uma estrutura muito porosa e pode sofrer reações heterogêneas, como a gaseificação e a combustão. As reações heterogêneas envolvem a combustão e gaseificação do *char* com o oxigênio e as outras espécies presentes na fase gasosa, principalmente o CO₂ e vapor de água H₂O (SMITH, 1978).

As três reações heterogêneas consideradas neste estudo estão dadas pelas Eqs. (3.17), (3.18) e (3.19):



Em ANSYS FLUENT quando se deseja modelar reações de combustão e gaseificação de uma partícula sólida com espécie gasosa, deve-se escolher o modelo de múltiplas reações de superfícies que permite configurar as reações dadas pelas Eqs. (3.17 – 3.19). A taxa de reação dessas equações é calculada com a Eq. (3.20):

$$\bar{R}_{j,r} = A_p \eta_r Y_j R_{j,r} \quad (3.20)$$

$$R_{j,r} = R_{kin,r} \left(p_n - \frac{R_{j,r}}{D_{0,r}} \right)^N \quad (3.21)$$

Sendo assim, $\bar{R}_{j,r}$, Y_j , η_r , $R_{j,r}$ são respectivamente, a taxa de depleção do *char* na superfície das partículas em (kg/s), a fração mássica do *char* na partícula, o fator de eficiência e a taxa de reação do *char* na superfície da partícula por unidade de área em (kg/m²-s). Os termos $D_{0,r}$ e $R_{kin,r}$ são o coeficiente da taxa de difusão para a reação r e a taxa cinética da reação r e definidas pela Eq. (3.22) e (3.23):

$$R_{kin,r} = A_r T_p^{\beta_r} e^{-(E_r/RT_p)} \quad (3.22)$$

$$D_{0,r} = C_{1,r} \frac{[(T_p + T_\infty)/2]^{0,75}}{d_p} \quad (3.23)$$

3.3.1.4 Reações homogêneas

Para a modelagem das reações de combustão das espécies gasosas existem vários modelos que podem ser adotados. Na modelagem da combustão pelo modelo *Finite Rate Chemistry* (FRC), os efeitos das flutuações turbulentas são desprezados e as taxas de reações são determinadas por expressões cinéticas de Arrhenius (Eq. 3.10). Porém, estudos mostraram que a taxa de reação é afetada pelo escoamento turbulento, devido à mistura das espécies reagentes (SHIOZAWA, 2013). Portanto, os modelos que consideram o efeito do escoamento turbulento na taxa de reação devem ser considerados.

O modelo *Eddy Breakup model* (EBU) foi proposto por Spalding (1971). Ele pressupõe que as reações estejam completas no momento da mistura, de modo que a taxa de

reação seja completamente controlada pela mistura turbulenta. A taxa de reação é calculada com a Eq. (3.24), onde C_{EBU} é a constante do modelo, ε é a taxa de dissipação turbulenta, κ é energia cinética turbulenta e g_f é a variância da fração de massa do produto.

$$r_i = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{\kappa} (g_f)^{1/2} \quad (3.24)$$

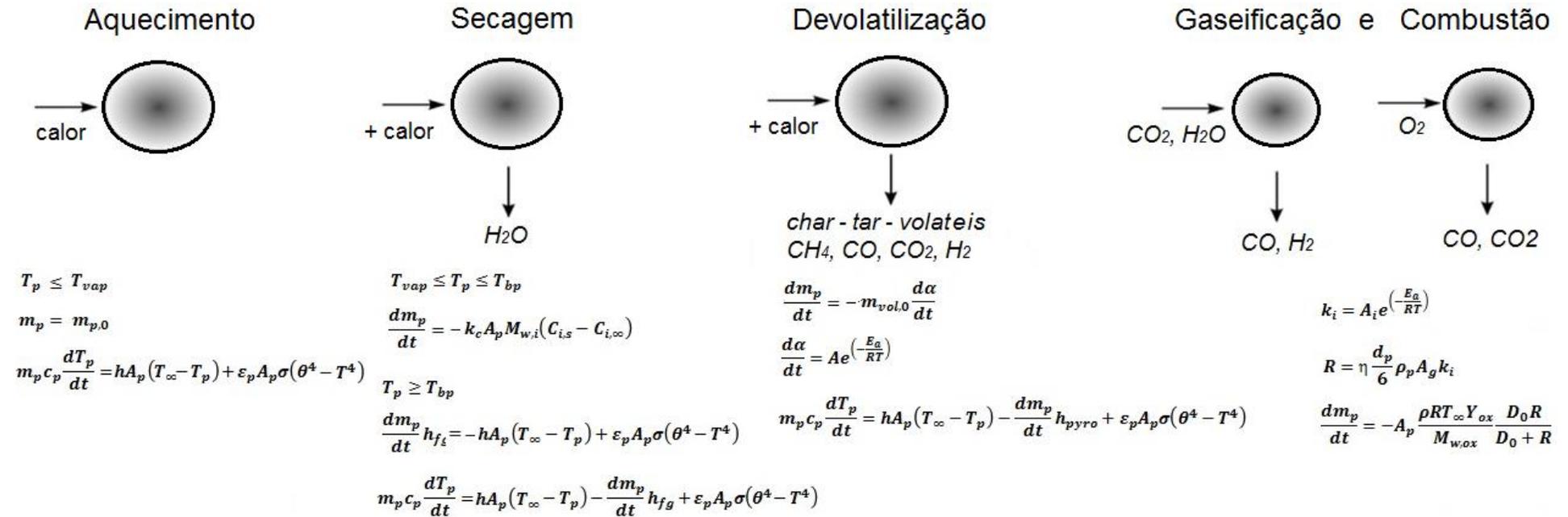
Já o modelo *Eddy Dissipation Model* (EDM) é uma modificação do modelo EBU, proposta por Magnussen e Hjertager (1976). O modelo usa o valor mínimo da fração mássica média das espécies de menor concentração na Eq. (3.25), onde $[i]$ é a concentração molar dos reagentes, v'_i é coeficiente estequiométrico para $[i]$ e C_A é uma constante de EDM (por exemplo, $C_A = 4$ in ANSYS FLUENT).

$$r_i = C_A \frac{\varepsilon}{\kappa} \min\left(\frac{[i]}{v'_i}\right) \quad (3.25)$$

No entanto, para obter melhores resultados, frequentemente é utilizada uma combinação dos modelos mencionados anteriormente na combustão gasosa. O modelo FRC pode-se combinar com o modelo EBU ou com o modelo EDM. A metodologia aplicada consiste no cálculo da taxa de reação por ambos os modelos separadamente e 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 o mais apropriado a cada passo da reação, permitindo a obtenção de resultados mais precisos do que aqueles gerados por estes modelos de forma isolada. Neste estudo o modelo combinado EDM/FRC é utilizado nas reações homogêneas.

As espécies de gases reativos produzidos durante a secagem e devolatilização reagem com outros gases ou com o oxigênio do ar primário. O calor gerado pelas reações exotérmicas é importante para a produção de voláteis, formação de fuligem ou ignição do carvão residual. Finalmente, a Figura 3.2 mostra a representação dos sub-processos da combustão de partículas sólidas e resume as equações que descrevem cada um dos modelos escolhidos para representar estes sub-processos.

Figura 3.2- Representação dos sub-processos na combustão de partículas sólidas e as equações dos modelos escolhidos em ANSYS FLUENT para as simulações da câmara de combustão.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

3.3.2 Modelagem fluidodinâmica da câmara de combustão ciclônica

As equações macroscópicas governantes são obtidas a partir das equações microscópicas correspondentes, através de um cálculo médio dos processos ao longo de um volume elementar representativo (REV) no método dos volumes finitos (MAHMOUDI, 2015).

A parte Euleriana de um escoamento turbulento reativo bifásico pode ser expresso como um sistema de equações diferenciais parciais que consideram a conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas. Em combustão, devido às mudanças na massa específica do gás, o sistema de equações normalmente é apresentado como médias da massa específica ou Favre *averaging*, onde a variável dependente ϕ pode ser decomposta em uma parte média, $\tilde{\phi}$, e uma parte flutuante, ϕ'' , da seguinte forma (TOPOROV, 2014):

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (3.26)$$

O sistema a seguir apresenta as equações governantes em forma de quantidades médias ou Favre-averaged. A equação da continuidade é dada pela seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \tilde{u}_j) = S_m \quad (3.27)$$

O termo fonte S_m é a massa adicionada à fase contínua desde uma segunda fase dispersa (por exemplo, devido à partículas e vaporização das gotas de líquido) e qualquer outra fonte definida no modelo particular. A equação da quantidade de movimento pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_g \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \bar{\rho}_g f_1 - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) + S_{u_j} \quad (3.28)$$

Onde S_{u_j} é o termo fonte da quantidade de movimento, \bar{p} é a pressão estática média, $\tilde{\tau}_{ij}$ é o tensor viscoso e $\bar{\rho}_g f_1$ é uma força de campo (por exemplo, a gravitacional). Em muitos sistemas de combustão, significativas variações de massa específica são alcançadas devido à liberação de calor. Portanto, as equações de conservação para a energia e massa de espécies individuais devem ser resolvidas com o propósito de obter o campo de massa específica (TOPOROV, 2014). A equação de transporte de entalpia é dada pela Eq. (3.29).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_g \tilde{h}_g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \tilde{u}_j \tilde{h}_g) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_h \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} + \Gamma_h \frac{\partial \tilde{h}''}{\partial x_j} + \overline{\rho u_j'' h''} \right) + \bar{\rho}_g \tilde{S}_{ch} + S_h + S_r \quad (3.29)$$

Os termos fonte S_r , \widetilde{S}_{ch} e S_h representam fontes de calor extras devido a radiação, espécies químicas e energia, respectivamente, pela iteração com a fase discreta. A entalpia sensível da mistura do gás é calculada por:

$$\widetilde{h}_g = \sum_k \widetilde{Y}_k \widetilde{h}_k \quad (3.30)$$

$$\widetilde{h}_k = \int_{T_{ref}}^T c_{p,k} dT \quad (3.31)$$

$$c_{p,k} = \int_{T_{ref}}^T \widetilde{Y}_k c_{p,k} \quad (3.32)$$

O termo \widetilde{Y}_k é a fração mássica da espécie k e a T_{ref} é igual a 298,15 K. O calor específico à pressão constante $c_{p,k}$ da espécie k é calculada usando o polinômio dependente da temperatura para cada espécie k . O transporte das frações mássicas das espécies químicas é calculado através da Eq. (3.33)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_g \widetilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_g \widetilde{u}_j \widetilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_Y \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_j} + \Gamma_Y \frac{\partial \widetilde{Y}_k''}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' \widetilde{Y}_k''} \right) + \bar{\rho}_g \widetilde{\omega}_k + S_{Y_k} \quad (3.33)$$

Neste estudo $k = CO, CO_2, H_2, H_2O, O_2, N_2, VM$. A última fração mássica, que corresponde a N_2 pode ser calculada a partir da relação $\sum_k Y_k = 1$. A equação de estado é dada pela Eq. (3.34):

$$\bar{\rho}_g = \frac{\bar{p} + P}{R\bar{T} \sum_k \frac{\widetilde{Y}_k}{M_k}} \quad (3.34)$$

Onde R é a constante universal dos gases e M é o peso molecular médio da mistura.

3.3.2.1 Modelagem da turbulência em escoamentos rotacionais com CFD

Como foi explicado no Capítulo 2 deste texto, os escoamentos rotacionais são altamente turbulentos, caracterizados por possuir redemoinhos com uma ampla gama de escalas de comprimento e de tempo, além de outras perturbações e características particulares causados pela rotação do fluido quando transmitidos por *swirlers*.

Antes de descrever os modelos de turbulência escolhidos para modelar o escoamento da câmara de combustão em estudo, se faz uma breve revisão dos conceitos relevantes com relação a modelos de turbulência clássicos e atuais mais empregados e suas características principais, com o objetivo de justificar as escolhas realizadas dos modelos.

De forma geral, independentemente da origem, natureza ou do nível de turbulência que apresenta um escoamento, os métodos numéricos empregados na modelagem para capturar os importantes efeitos devido à turbulência podem ser agrupados em três categorias:

1. Modelos de turbulência para as equações Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)
2. Large Eddy Simulation (LES)
3. Simulação Numérica Direta (DNS)

Nos modelos RANS, inicialmente as equações de Navier-Stokes são médias no tempo antes de aplicar os métodos numéricos. A abordagem RANS se baseia nos termos médios do escoamento e os efeitos da turbulência sobre as médias das propriedades do escoamento (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007). Termos extras aparecem nas equações do escoamento em médias no tempo (Reynolds-averaged), devido às iterações entre várias flutuações turbulentas. Esses termos extras são modeladas com modelos de turbulência clássicos como os modelos $k - \varepsilon$ e o modelo de tensões de Reynolds ou modelo RMS.

O custo computacional necessário para obter resultados razoavelmente precisos é relativamente baixo, portanto essa abordagem tem sido a mais popular entre os modelos de turbulência para os escoamentos de engenharia nas últimas três décadas, principalmente os modelos $k - \varepsilon$ padrão (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007; TOPOROV, 2014; FLUENT, 2017).

Os modelos de turbulência RANS mais comuns são classificados em base ao número de equações de transporte adicionais, que são necessários para resolver as equações de escoamento. Assim, tem-se modelos com zero, uma, duas e sete equações de transportes adicionais, que correspondem respectivamente, aos modelos de comprimento de mistura, modelo Spalart-Allmaras, modelos $k - \varepsilon$ e modelos $k - \omega$ e modelo de tensões de Reynolds ou RMS (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007; FLUENT, 2017).

Dos modelos clássicos RANS mencionados, os modelos de comprimento de mistura e $k - \varepsilon$ são atualmente os mais amplamente utilizados e validados. Eles estão baseados nas hipóteses de que existe uma analogia entre a ação das tensões viscosas e tensões de Reynolds no escoamento médio (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007). Em relação aos modelos *Realizable* e RNG $k - \varepsilon$, eles mostraram melhorias substanciais em relação ao modelo $k -$

ε padrão, quando as características do escoamento incluem forte curvatura das correntes de linha, vórtices e rotação. Porém, como os modelos ainda são relativamente novos, não está claro em quais instâncias o modelo *Realizable* supera consistentemente o modelo RNG, mas estudos iniciais mostraram que o modelo *Realizable* fornece o melhor desempenho de todas as versões do modelo $k - \varepsilon$ para várias validações de escoamentos (FLUENT, 2017).

Em contrapartida, o modelo RSM incorpora efeitos que os modelos de turbulência de duas equações são incapazes de capturar, como as relações mais sutis entre a produção de energia turbulenta e as tensões turbulentas causadas pela anisotropia das tensões normais, mas vários outros processos de turbulência desconhecidos (correlações pressão-deformação, difusão turbulenta das tensões de Reynolds, dissipação) precisam ser modelados, o que aumenta as demandas para o armazenamento do computador e os tempos de execução (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007).

Por outro lado, o modelo LES é uma forma intermediária dos cálculos de turbulência, que rastreia o comportamento dos vórtices ou redemoinhos maiores. Para tal objetivo, o método utiliza a operação de filtragem no domínio com as equações de Navier-Stokes transientes para rastrear os redemoinhos maiores e rejeitar os redemoinhos menores (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). A essência do LES é calcular os maiores redemoinhos da estrutura turbulenta do campo do escoamento com uma simulação dependente do tempo, enquanto os menores podem ser modelados com um modelo compacto. Esta técnica atualmente é amplamente usada em escoamentos não reativos, mas na combustão ainda está em fase de aprendizagem no seu uso em modelagem (TOPOROV, 2014; FLUENT, 2017).

O método começa com a seleção de uma função de filtragem e uma certa amplitude de corte, com o objetivo de rastrear em um cálculo de escoamento transiente todos aqueles redemoinhos com uma escala de comprimento maior que a amplitude de corte. Na próxima etapa, a operação de filtragem espacial é realizada nas equações de escoamento dependentes no tempo. Durante a filtragem espacial a informação relacionada aos redemoinhos turbulentos menores filtrados são destruídas (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), os efeitos de interação entre os redemoinhos maiores resolvidos e os menores não resolvidos dão origem a tensões na escala sub-malha ou tensões SGS. Seus efeitos sobre o escoamento resolvido deve ser descrito por meio de um modelo SGS. Se o método de volumes finitos é usado, as equações de

escoamento filtradas por espaço dependentes no tempo serão resolvidas em uma malha de volumes de controle, juntamente com o modelo SGS das tensões não resolvidas.

E quanto aos recursos computacionais, a inerente natureza transiente do LES aumenta consideravelmente este aspecto em termos de tempo de CPU e memória RAM na modelagem da turbulência, isto comparado com os modelos clássicos de turbulência como os modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$. No entanto, quando comparado com o modelos RMS que exigem a solução de sete equações diferenciais parciais adicionais, foi notado que o modelo LES pode precisar apenas de duas vezes os recursos computacionais para realizar o mesmo cálculo com o modelo RMS (FLUENT, 2017; VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007).

O pós-processamento dos resultados do LES fornece informações relacionadas ao escoamento médio e às estatísticas das flutuações resolvidas. Embora, o LES deve ser executado por um tempo suficientemente longo para obter estatísticas estáveis do escoamento que está sendo modelado (FLUENT, 2017). Em combustão, as instabilidades do escoamento têm sérias consequências para o processo, e as informações geradas pelos cálculos do LES são exclusivamente aplicáveis ao desenvolvimento dessa tecnologia.

Com relação ao modelo de simulação numérica direta (DNS), utiliza o conjunto de equações exatas de Navier–Stokes como ponto de partida, e desenvolve uma solução transiente sobre uma malha espacial muito refinada com passos de tempo suficientemente pequenos para resolver até mesmo os menores redemoinhos turbulentos e as flutuações mais rápidas (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007).

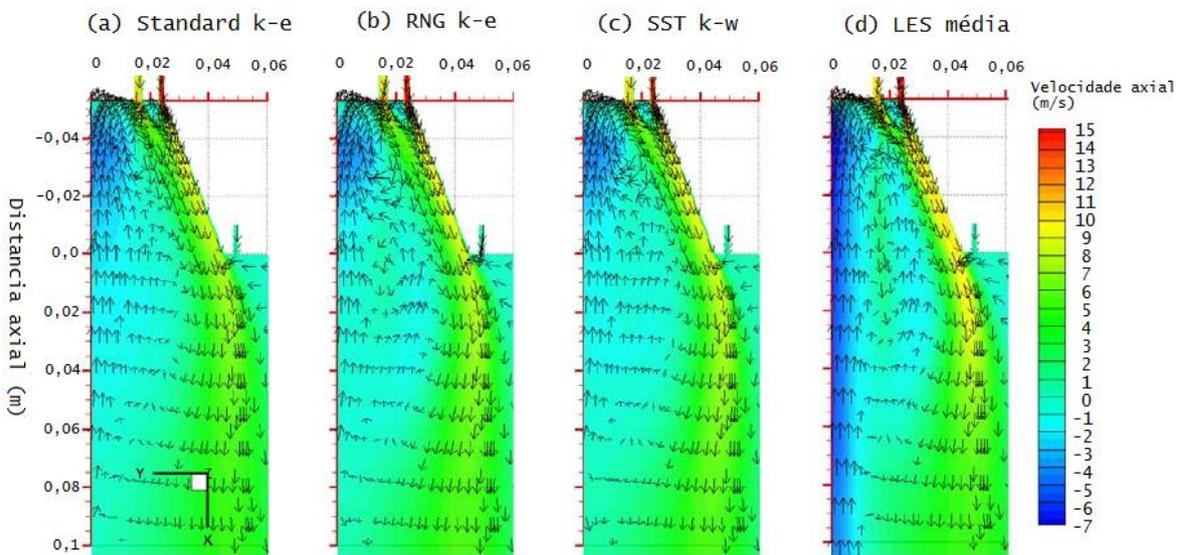
Entre os potenciais benefícios que podem ser obtidos pelo uso do modelo DNS estão: cálculos detalhados e precisos dos parâmetros de turbulência, seu transporte e previsão em qualquer ponto do escoamento. Também, resultados instantâneos podem ser gerados e estruturas da turbulência podem ser visualizados, por exemplo, os termos de correlação pressão-deformação podem ser calculados com precisão a partir do modelo DNS, mas não podem ser medidos pelo modelo de turbulência RMS por exemplo (FLUENT, 2017).

Porém, observa-se que a solução direta das equações de escoamento é muito difícil devido à grande variedade de escalas de comprimento e tempo causadas pelo aparecimento de redemoinhos em um escoamento turbulento. Por exemplo, para resolver as escalas de comprimento menores e maiores em uma simulação direta de um escoamento turbulento com número de Reynolds modesto na faixa de 10^4 poderiam ser necessários malhas de

cálculo com aproximadamente 10^9 nodos (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007). Assim, precisa-se de um elevado refinamento do domínio computacional e são necessários esquemas de discretização espacial e temporal de alta ordem para minimizar a difusão numérica no processo de cálculo.

A Figura 3.3 mostra uma comparação de diferentes modelos de turbulência aplicados no estudo de um queimador *swirl*. O gráfico permite visualizar os detalhes dos vetores de velocidade axial com os diferentes modelos de turbulência, a zona de recirculação pode ser apreciada melhor com os modelos RNG $k - \varepsilon$ e LES médio.

Figura 3.3- Predições da distribuição de velocidade axial em um queimador *swirl* por meio de diferentes modelos de turbulência.



Fonte: Adaptado de Chen (2013).

3.3.2.2 Escolha dos modelos de turbulência para escoamentos rotacionais

Nesta tese, no estudo da câmara ciclônica adotou-se dois critérios para realizar a escolha do modelo de turbulência a ser utilizada. Um dos métodos se baseia na análise dos próprios conceitos teóricos que definem a funcionalidade desses modelos de turbulência, e também em relatos sobre investigações que utilizaram diferentes modelos de turbulência em escoamentos rotacionais. O segundo método de escolha dos modelos de turbulência baseia-se na quantificação da intensidade da componente tangencial no escoamento e usa o critério do valor do número *swirl* para classificar os modelos de turbulência RANS segundo a Tabela 3.1

Desta forma, nos seguintes parágrafos desta seção se faz a aplicação destes critérios para a escolha, e posteriormente realiza-se a descrição matemática das equações que governam esses modelos.

Por volta dos anos 80's Sloan *et al.* (1986) investigaram a precisão dos modelos $k - \varepsilon$ por meio de comparações com casos experimentais disponíveis, e tinham concluído que o modelo falha ao mostrar o tamanho certo ou a força das regiões de escoamento reverso. Adicionalmente, no modelo deles as velocidades radiais previstas caem a zero mais rapidamente que os resultados experimentais, e a velocidade tangencial frequentemente se espalha prematuramente para uma distribuição de vórtice forçada, enquanto os perfis experimentais mantêm um perfil grande de vórtice livre. Seu desempenho geralmente é ruim nas proximidades do colapso da bolha. Portanto, sabendo-se das limitações do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão com relação a sua habilidade para prever o tamanho e força das zonas de recirculação interna induzida pela rotação, a sua utilização no presente trabalho foi descartada.

Versões mais atuais do modelo $k - \varepsilon$, como os modelos RNG e *Realizable* $k - \varepsilon$, mostram melhorias na previsão das características de escoamentos rotacionais. O modelo RNG oferece uma opção para quantificar os efeitos da rotação ou *swirl* em um escoamento, modificando a viscosidade turbulenta adequadamente. Por sua vez, o modelo *Realizable* originalmente foi proposto para solucionar as deficiências dos modelos tradicionais com relação aos jatos envolventes, propondo uma nova formulação para a viscosidade turbulenta. Desta forma, os modelos RNG e *Realizable* $k - \varepsilon$ são potenciais candidatos a serem usados para a modelagem da turbulência no combustor ciclônico.

O modelo $k - \omega$ de transporte de tensão de cisalhamento (SST) embora tenha um desempenho melhor que os modelos $k - \varepsilon$ padrão e RNG, ainda produz transporte difusivo radial excessivo, tanto a montante quanto a jusante de um escoamento fortemente rotacional. Acredita-se que a deficiência persistente desses modelos seja o resultado do uso do conceito de viscosidade-turbulenta isotrópica pela aproximação de Boussinesq, onde as tensões de Reynolds estão relacionadas a gradientes de velocidade média (DA SILVA, 2013).

Com relação ao modelo RSM, fica evidente as vantagens que esta abordagem fornece para o estudo da fluidodinâmica da câmara de combustão que está sendo estudado, principalmente porque considera os efeitos da curvatura das correntes de linha, rotação e mudanças rápidas na taxa de deformação de uma maneira mais rigorosa do que os modelos

de uma e duas equações, assim tem maior potencial para fornecer previsões precisas em escoamentos complexos. No entanto, devido ao custo computacional adicional que o modelo requer para resolver as sete equações adicionais, o uso do modelo RSM deve ser criteriosamente avaliado. O modelo RMS foi utilizado no estudo realizado por Da Silva, (2013) na modelagem da fluidodinâmica (sem combustão) de um queimador. O tempo computacional gasto utilizando um computador de 2,93 GHz Xeon X5570 com um total de 48 GB de RAM (6 GB RAM/ núcleo) foi de aproximadamente 62 minutos e 5 segundos para cada 1000 iterações, sendo que foram necessários aproximadamente 42000 iterações para a convergência, isto para uma malha computacional refinada de 1,40 milhão de células.

Brevemente até aqui foi realizada uma análise dos modelos de turbulência e sua adequação com escoamentos ciclônicos. No entanto, na descrição da parte matemática de cada modelo escolhido será aprofundada mais sobre eles. A continuação mostra-se o critério para escolher o modelo de turbulência para escoamentos rotacionais, considerando a intensidade da rotação no escoamento, com os seguintes valores do número de *swirl*:

Tabela 3.1-Escolha do modelo de turbulência segundo o grau de rotação de um escoamento

Número de <i>swirl</i>	Grau de rotação	Modelo de turbulência recomendado
$S < 0,6$	escoamentos com rotação moderado/fraco	modelo: $k - \varepsilon$ (RNG ou <i>Realizable</i>)
$S > 0,6$	escoamentos com rotação elevada	modelo: tensões de Reynolds (RMS)

Fonte: Elaborado a partir de Lefebvre e Ballal (2010).

Um outro modelo frequentemente aplicado, e com sucesso à análise de problemas envolvendo escoamentos rotacionais, especialmente em simulações de combustores de turbinas a gás, é o modelo de transporte de tensões cisalhantes SST $k - \omega$ (KUMAR E GHONIEM, 2012)

Portanto, os modelos que serão utilizados nas simulações da câmara de combustão ciclônica são: o modelo de turbulência *Realizable* $k - \varepsilon$, o grupo renormalizado RNG $k - \varepsilon$, o modelo de tensões de Reynolds (RMS) e o modelo SST $k - \omega$. Embora os modelos $k - \varepsilon$ *Realizable* e RNG são recomendados para escoamentos com rotação moderado, acredita-se que podem fornecer resultados interessantes para efeitos de comparação com o modelo RMS.

Em seguida, é realizada uma descrição das equações matemáticas que governam estes modelos de turbulência escolhidos.

Segundo Toporov (2014) as equações de quantidade de movimento, energia e transporte de espécies, dadas pelas Eqs. (3.28), (3.29) e (3.33), possuem termos desconhecidos que podem ser divididos em dois grupos:

1. Termos definindo escoamentos difusivos: $\overline{\rho u_i'' u_j''}$, $\overline{\rho u_i'' Y_k''}$, $\overline{\rho u_i'' h''}$.
2. Termo definindo a taxa de reação média: $\overline{\rho \tilde{\omega}_k}$

A forma como esses termos influenciam os valores médios das variáveis é uma questão fundamental na modelagem de combustão turbulenta (TOPOROV, 2014). Portanto, as correlações turbulentas do grupo 1 precisam ser determinadas ou modeladas. O método mais simples é assumir transporte de gradientes, assim as tensões de Reynolds tomam a forma:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \left(\frac{2}{3} \overline{\rho k} + \frac{2}{3} \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (3.35)$$

Onde μ_t é a viscosidade dinâmica turbulenta e pode ser encontrada a partir da seguinte equação:

$$\mu_t = C_\mu \overline{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (3.36)$$

Sendo C_μ uma constante do modelo, se a energia cinética turbulenta média \tilde{k} e a taxa de dissipação média $\tilde{\epsilon}$ são conhecidas, as tensões de Reynolds $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ podem ser calculadas.

a. Modelo de turbulência RNG $k - \epsilon$

O modelo RNG $k - \epsilon$ ou grupo de renormalização foi derivada das equações instantâneas de Navier-Stokes usando técnicas estatísticas denominadas “grupo de renormalização” (FLUENT, 2017). Este modelo representa os efeitos das menores escalas da turbulência por meio de uma função de força aleatório na equação de Navier-Stokes. O procedimento RNG remove sistematicamente as pequenas escalas de movimento das equações que as governam, expressando seus efeitos em termos de movimentos de escalas maiores e uma viscosidade turbulenta modificada (VERSTEEG E MALALASEKERA, 2007).

O modelo RNG $k - \varepsilon$ inclui as seguintes melhoras com relação ao modelo $k - \varepsilon$ padrão:

1. O modelo RNG tem um termo adicional na sua equação de, ε , que melhora a precisão em escoamentos de rápida deformação.
2. Os efeitos do *swirl* sobre a turbulência são incluídos no modelo RNG, melhorando a precisão em simulação de escoamentos rotacionais.
3. A teoria RNG fornece uma formula analítica para número turbulento de Prandtl, enquanto o modelo padrão usa valores constantes especificados pelo usuário.
4. Enquanto o modelo padrão é um modelo para valores de número de Reynolds elevados, a teoria RNG fornece uma fórmula diferencial derivada analiticamente para viscosidade efetiva que responde pelos efeitos de número de Reynolds baixo.

Estas características tornam o modelo RNG mais preciso e confiável para um amplo grupo de escoamentos. As equações que descrevem o modelo são dadas pelas Eqs. (3.37) e (3.38):

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{k})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right] + \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2}^* \tilde{\varepsilon}) \quad (3.38)$$

Onde $C_{\varepsilon 2}^*$ e η^* são calculados pelas Eqs. (3.39) e (3.40) da seguinte forma:

$$C_{\varepsilon 2}^* = C_{\varepsilon 2} + \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta / \eta_0)}{1 + \beta \eta^3} \quad (3.39)$$

$$\eta^* = \frac{Sk}{\varepsilon} \quad (3.40)$$

As constantes do modelo $C_{\varepsilon 1} = 1,42$ e $C_{\varepsilon 2} = 1,68$, têm seus valores derivados analiticamente pela teoria RNG. Os valores de η_0 e β é 4,38 e 0,012, respectivamente. O termo S pode ser calculada por:

$$S = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2} \quad (3.41)$$

Onde a viscosidade turbulenta μ_t pode ser calculada com a Eq. (3.36) com $C_\mu = 0,085$, derivado usando a teoria do RNG. É interessante notar que este valor é muito próximo do

valor 0,09 que foi determinado empiricamente para o modelo $k - \varepsilon$ padrão (FLUENT, 2017). Outras constantes do modelo estão dadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2-Valores das constantes dos modelos de turbulência.

Modelo de turbulência	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_{μ}	σ_k	σ_{ε}	C_1	C_2
RNG $k - \varepsilon$	1,42	1,68	0,085	1,393	1,393	-	-
<i>Realizable</i> $k - \varepsilon$	1,44	1,9	-	1,0	1,2	-	-
RMS	1,44	1,92	0,065	-	1,3	1,8	0,6

Fonte: Elaborado a partir dos dados de (Toporov, 2014; ANSYS FLUENT, 2017).

Adicionalmente, o modelo RNG de ANSYS FLUENT oferece uma opção para quantificar os efeitos da rotação ou *swirl* em um escoamento, modificando a viscosidade turbulenta adequadamente. A modificação tem a seguinte forma funcional:

$$\mu_t = \mu_{t0} f\left(\alpha_s, \Omega, \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}}\right) \quad (3.42)$$

O termo μ_{t0} é o valor da viscosidade turbulenta calculada, sem a modificação para escoamentos rotacionais usando a Eq. (3.36). O termo Ω é um número *swirl* característico avaliado no ANSYS FLUENT, e α_s é uma constante *swirl* que assume diferentes valores dependendo da intensidade rotacional. Essa modificação para escoamentos rotacionais é executado quando o modelo RNG é selecionado para escoamentos axissimétricos, rotacionais e tridimensionais (FLUENT, 2017).

b. Modelo de turbulência Realizable $k - \varepsilon$

Uma das deficiências do modelo $k - \varepsilon$ padrão ou outros modelos tradicionais do $k - \varepsilon$ reside na modelagem da equação da taxa de dissipação ε . A conhecida anomalia de jato envolvente, denominada devido à constatação de que a taxa de espalhamento em jatos planares é razoavelmente bem prevista, mas a previsão dessa taxa para jatos axissimétricos é inesperadamente ruim, sendo considerada principalmente devido à modelagem da equação de dissipação (FLUENT, 2017).

O modelo *Realizable* $k - \varepsilon$ proposto por Shih *et al.* (1995) pretende solucionar essas deficiências dos modelos tradicionais adotando os seguintes dois pontos:

1. Uma nova fórmula de viscosidade turbulenta envolvendo a variável C_μ proposta originalmente por Reynolds.
2. Uma nova equação de modelo para a dissipação, ε , baseada na dinâmica da equação da média dos quadrados da flutuação de vorticidade.

As equações de transporte para k e ε no modelo *Realizable k - ε* são dadas pelas Eqs. (3.43) e (3.44):

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right] + P_k - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right] + \bar{\rho}C_1 S \tilde{\varepsilon} - \bar{\rho}C_2 \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k} + \sqrt{\nu \tilde{\varepsilon}}} + C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} C_{3\varepsilon} \quad (3.44)$$

Os termos η e S podem ser calculados com a Eq. (3.40) e (3.41), respectivamente. O valor da constante C_1 pode ser calculado pela Eq. (3.45).

$$C_1 = \max \left[0,43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (3.45)$$

Nota-se que a equação da energia cinética turbulenta k é a mesma dos modelos $k - \varepsilon$ padrão e RNG, mas com valores diferentes das constantes. No entanto, a forma da equação ε é bem diferente daquela dos modelos padrão e RNG, mostrando as suas próprias características.

E quanto à modelagem da viscosidade turbulenta, ao igual que outros modelos $k - \varepsilon$ é calculada a partir da Eq. (3.36). A diferença é que este termo não é mais uma constante no modelo *Realizable k - ε*, e pode ser calculado a partir das Eqs. (3.46) a (3.47).

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\varepsilon}} \quad (3.46)$$

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}} \quad (3.47)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} \equiv \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ijk}\omega_k \quad (3.48)$$

$$\Omega_{ij} \equiv \overline{\Omega_{ij}} - \varepsilon_{ijk}\omega_k \quad (3.49)$$

Onde $\overline{\Omega_{ij}}$ é o tensor médio da taxa de rotação visto em um marco de referência móvel com a velocidade angular ω_k . As constantes do modelo são: $A_0 = 4,04$ e $A_s = \sqrt{6} \cos \emptyset$. O termo \emptyset pode ser calculado a partir da Eq. (3.50).

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W) \quad (3.50)$$

$$W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3} \quad (3.51)$$

$$\tilde{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}} \quad (3.52)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.53)$$

Assim, pode ser visto que C_μ é uma função das taxas de rotação e tensões médias, da velocidade angular do sistema rotacional e dos campos de turbulência (k e ε). Outras constantes do modelo estão dadas na Tabela 3.2.

O modelo *Realizable k – ε* foi extensivamente validado para uma ampla faixa de escoamentos, incluindo escoamentos rotacionais de cisalhamento homogêneo, escoamentos livres, incluindo jatos e camadas de mistura, escoamentos em canais, camada limite sob fortes gradientes de pressão adversa, separação e recirculação. Para todos esses casos, o desempenho do modelo foi substancialmente melhor que o modelo padrão (FLUENT, 2017). Destaca-se o fato que o modelo *Realizable k – ε* resolve a anomalia do jato envolvente, que era a razão da sua criação.

Uma limitação do modelo *Realizable k – ε* é que ele produz viscosidades turbulentas não-físicas em situações em que o domínio computacional contém zonas de fluido rotativos e estacionárias (por exemplo, vários marcos de referência, malhas rotativas deslizantes). Isso se deve ao fato de que o modelo de *Realizable k – ε* inclui os efeitos da rotação média na definição da viscosidade turbulenta. Esse efeito de rotação extra foi testado em sistemas de referencial móvel e mostrou comportamento superior ao modelo $k – \varepsilon$ padrão. No entanto, devido à natureza dessa modificação, sua aplicação em sistemas de vários marcos de referência deve ser tomada com cautela (FLUENT, 2017).

c. Modelo de Turbulência Reynolds Stress ou RMS

Uma alternativa para a hipótese do transporte de gradientes dada pela Eq. (3.35), é resolver uma equação de transporte para cada uma das tensões de Reynolds. No entanto, nas equações de transporte exatas para as tensões de Reynolds aparecem correlações desconhecidas de terceira ordem e, portanto são necessárias suposições de modelagem para fechar o sistema de equações (TOPOROV, 2014). A equação de tensão de Reynolds resultante tem a forma:

$$\frac{\partial(\overline{\rho u_i'' u_j''})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u_i'' u_j'' \tilde{u}_k}) - \bar{\rho}(D_{ij,v} + D_{ij,t}) = \bar{\rho}(P_{ij} + \Phi_{ij} + \epsilon_{ij}) \quad (3.54)$$

Onde o primeiro e segundo termo representam, respectivamente, o transporte transiente e convectivo com o escoamento médio, $D_{ij,v}$ e $D_{ij,t}$ são a difusão viscosa e difusão turbulenta, respectivamente, P_{ij} é a produção de turbulência ou transferência de energia mecânica desde o escoamento médio à turbulência realizado pelas tensões de Reynolds, $\overline{u_i'' u_j''}$; Φ_{ij} é a redistribuição ou troca de energia entre os componentes e ϵ_{ij} é a dissipação ou transferência de energia cinética à energia térmica. A convecção, a produção P_{ij} , e a difusão viscosa $D_{ij,v}$ são funções de quantidades conhecidas, e portanto não precisam ser modeladas. Estes termos podem ser calculados a partir das seguintes equações:

$$\rho D_{ij,v} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} \right) \quad (3.55)$$

$$P_{ij} = -\overline{u_k'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \overline{u_k'' u_i''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} \quad (3.56)$$

A taxa de produção de energia cinética turbulenta P_k , dada pela Eq. (3.58) no modelo $k - \epsilon$, no modelo RSM pode ser expressada como:

$$P_{ij} = \frac{1}{2} P_{ii} \quad (3.57)$$

Adicionalmente, torna-se necessário definir uma escala de comprimento ou uma escala de tempo para a turbulência. A forma usual para proporcionar tal escala é resolver uma equação para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta $\tilde{\epsilon}$. Pode ser a mesma equação para a dissipação do modelo $k - \epsilon$ (Eq. 3.38), com o termo de difusão turbulenta modificado:

$$D_{\epsilon,t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(C_\epsilon \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}} \overline{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_k} \right) \quad (3.58)$$

A constante do modelo C_ϵ , frequentemente é configurado a 0.18. A razão $\tilde{k}/\tilde{\epsilon}$, e é usado como escala de tempo³ (TOPOROV, 2014). A energia cinética turbulenta pode ser calculada da Eq. (3.59):

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_j'' u_k''} = \frac{1}{2} (\overline{u_1''^2} + \overline{u_2''^2} + \overline{u_3''^2}) \quad (3.59)$$

³ Expressa a "vida útil" de um redemoinho da turbulência.

Os termos Φ_{ij} , $D_{ij,t}$ e ϵ_{ij} , da Eq. (3.54) precisam ser modelados para poder fechar ou resolver o sistema de equações. O termo Φ_{ij} representa as correlações entre pressão-tensões e frequentemente é chamado de redistribuição, pode ser modelado com a Eq. (3.60):

$$\rho\Phi_{ij} = p' \overline{\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} \quad (3.60)$$

A abordagem clássica para modelar o termo da redistribuição é dividi-lo em três componentes, da seguinte forma:

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ij,w} \quad (3.61)$$

Onde $\Phi_{ij,1}$ e $\Phi_{ij,2}$ são conhecidos como o componente “lento” e “rápido”, respectivamente, e modelados com as Eqs. (3.62) e (3.63):

$$\Phi_{ij,1} = -C_1 \frac{\tilde{\epsilon}}{\bar{k}} \left(\overline{u_i'' u_j''} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' u_k''} \right) \quad (3.62)$$

$$\Phi_{ij,2} = -C_2 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{kk} \right) \quad (3.63)$$

O modelo para o termo rápido $\Phi_{ij,2}$ originalmente foi proposto como uma alternativa do modelo para o termo lento, $\Phi_{ij,1}$. No entanto, a soma desses dois modelos fornece resultados razoavelmente bons. As constantes C_1 e C_2 têm valores definidos por Gibson e Lauder, (1978) como $C_1 = 1,8$ e $C_2 = 0,6$ e por Gibson e Younis (1986) como $C_1 = 3,0$ e $C_2 = 0,3$. O terceiro termo $\Phi_{ij,w}$ é causado pela reflexão das flutuações de pressão desde as paredes quando são consideradas as iterações entre parede e o escoamento, e modelos de amortecimento das flutuações normais à parede. O modelo de redistribuição é considerado como a parte mais incerta na equação do modelo para as tensões de Reynolds (TOPOROV, 2014).

O modelo mais comum para o termo de difusão turbulenta $D_{ij,t}$ é um modelo de gradiente proposto por Daly e Harlow (1970) e descrito pela Eq. (3.64). A constante do modelo C_s frequentemente é configurado em 0,22.

$$D_{ij,t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_s \frac{\bar{k}}{\tilde{\epsilon}} \overline{u_k'' u_l''} \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} \right) \quad (3.64)$$

Embora o modelo de Daly e Harlow seja baseado apenas na difusão em gradiente, é considerado como um modelo padrão ou básico para a difusão turbulenta. Este modelo pode ser simplificado pelo uso de uma viscosidade turbulenta segundo se descreve na Eq. (3.65):

$$D_{ij,t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C'_\mu \frac{\overline{k^2}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \right) \quad (3.65)$$

Para estar em correspondência com o modelo de redistribuição a constante C'_μ deve ser uma função das constantes do modelo de redistribuição. Isso significa que C'_μ não precisa ser igual ao C_μ do modelo de turbulência $k - \epsilon$. O tensor de dissipação ϵ_{ij} comumente é modelado usando um modelo isotrópico. Isto significa que a dissipação é igual para as três tensões normais, assim:

$$\epsilon_{ij} = \frac{2}{3} \tilde{\epsilon} \delta_{ij} \quad (3.66)$$

Os valores das constantes do modelo RMS comumente usados estão dados na Tabela 3.2. O modelo RMS é o tipo de modelo de turbulência RANS mais elaborado que o ANSYS FLUENT oferece. Abandonando a hipótese de viscosidade isotrópica, o RSM fecha as equações de Navier-Stokes de Reynolds calculando as equações de transporte para as tensões de Reynolds, juntamente com uma equação para a taxa de dissipação. Isso significa que cinco equações de transporte adicionais são necessárias em escoamentos 2D, e sete equações de transporte adicionais resolvidas para 3D.

d. Modelo de turbulência SST $k-\omega$

O modelo de turbulência $k-\omega$ é um modelo de duas equações baseado na formulação da viscosidade turbulenta similar ao modelo $k-\epsilon$, mas com ϵ sendo substituído por ω o qual é análogo a ϵ/k . Uma versão do modelo $k-\omega$ é o modelo de transporte de tensões cisalhantes (SST) $k-\omega$. O novo modelo SST $k-\omega$ aprimorou a precisão do modelo $k-\epsilon$ padrão para escoamentos próximos à parede e escoamento livre usando a função de mistura. Esta função de mistura é zero próxima à parede (levando ao uso do modelo $k-\omega$) e é igual à unidade em escoamentos livres longe da superfície da parede (levando ao uso do modelo $k-\epsilon$ padrão) (KANGWANPONGPAN, 2013).

O modelo SST mostrou melhor desempenho que os modelos *Realizable*, padrão e RNG $k-\epsilon$ em situações com escoamento rotacionais (EIAMSA-ARD *et al.* 2009). Segundo Engdar e Klingmann (2002) o modelo SST prevê a presença e tamanho das zonas de recirculação em escoamentos rotacionais confinados com bastante precisão em comparação com os modelos padrão e não linear $k-\epsilon$, que normalmente falham na previsão da presença para escoamento com elevados número *swirl*. Também no estudo de Engdar *et al.* (2004) o

modelo SST realizou melhores previsões da longitude da chama e a intensidade turbulenta quando comparado com o modelo padrão $k-\varepsilon$ em simulações de combustão pre-misturadas.

3.3.3 Movimento das partículas

A queima total das partículas combustíveis depende não apenas do comportamento da combustão, mas também da formação do campo de combustão pelo escoamento das partículas. O escoamento da fase sólida é modelado usando uma abordagem Lagrangiana. O modelo assume a fase de partículas como uma fase discreta, ou seja, as partículas são rastreadas ao longo de suas trajetórias como partículas discretas, e se negligenciam a interação física entre as partículas (SHIOZAWA, 2013; TOPOROV, 2014). Assim, as trajetórias de uma partícula são calculadas pela equação da segunda lei de Newton que é expressa pelas forças atuando no centro de massa de cada partícula i da seguinte forma:

$$F_{p,i} = m_{p,i} \frac{du_{p,i}}{dt} \quad \text{com} \quad u_{p,i} = \frac{dx_{p,i}}{dt} \quad (3.67)$$

Para muitas aplicações práticas de escoamentos diluídos, como é o caso da combustão de combustíveis pulverizados, a equação da quantidade de movimento para uma partícula esférica movimentando-se em um fluido viscoso que experimenta uma força de sustentação devido aos gradientes locais de velocidade do fluido em movimento, pode ser escrito como a Eq. (3.68). Esta equação simplificada despreza as forças de Basset, massa virtual, Magnus, Saffmann, e força de empuxo (*bouyancy*).

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (u_{g,i} - u_{p,i}) + g_i \quad (3.68)$$

Onde i representa a direção e τ_p é o tempo de relaxação da partícula, definida como a taxa de resposta da aceleração de partículas à velocidade relativa entre a partícula e o gás, é expressado como:

$$\tau_p = \frac{24\rho_p d_p^2}{18\mu_f C_D Re_p} \quad (3.69)$$

O software ANSYS FLUENT utiliza o trabalho de MORSI e ALEXANDER, (1972) para calcular o coeficiente de arrasto de partículas consideradas esféricas, com a seguinte equação:

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (3.70)$$

Onde a_1 , a_2 e a_3 são constantes que se aplicam a várias faixas de números de Reynolds dados por MORSI e ALEXANDER (1972). O principal problema na resolução da Eq. (3.68) é estimar a velocidade instantânea do fluido $u_{g,i}$ para cada localização da partícula, conforme esta se move em intervalos de tempo discretos, através do campo da velocidade do fluido Euleriano (TOPOROV, 2014). Logo, há dois métodos para definir a velocidade do fluido: métodos determinísticos e estocásticos. A diferença entre os dois métodos é que o modelo de dispersão determinístico despreza o efeito dispersivo devido às flutuações turbulentas, e o modelo estocástico de dispersão considera as flutuações da turbulência. Portanto, o modelo estocástico é mais apropriado na combustão de combustíveis particulados, porque o fenômeno da dispersão é de grande importância na previsão das interações complexas entre a turbulência e as partículas combustíveis na zona de reação de um combustor ciclônico.

Em ANSYS FLUENT, a dispersão turbulenta das partículas é determinada pela flutuação de velocidade turbulenta u'_g Eq. (3.71), comprimento do redemoinho l_e Eq. (3.72) e tempo de vida do redemoinho τ_2 Eq. (3.73):

$$u'_g = \Gamma \left(\frac{2k}{3} \right)^{0,5} \quad (3.71)$$

$$l_e = \frac{C_\mu^{0,75} k^{1,5}}{\varepsilon} \quad (3.72)$$

$$\tau_2 = l_e \left(\frac{2k}{3} \right)^{0,5} \quad (3.73)$$

3.3.3.1 Modelagem de partículas não-esféricas

Para determinar a quantidade de movimento de partículas de forma bastante irregular, por exemplo, do bagaço da cana-de-açúcar, considera-se necessário calcular a força de arrasto e força devido à gravidade. Forças devido a gradientes de pressão, forças de empuxo, massa virtual, Basset, rotação das partículas em gradientes de velocidade, forças de sustentação devido aos efeitos de Saffman e Magnus, e torque aplicado à partícula não são considerados. Haider e Levenspiel (1989) desenvolveram uma correlação para partículas não-esféricas:

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + ARe^B) + \frac{C}{1 + \frac{D}{Re}} \quad (3.74)$$

Onde A, B, C e D são funções empíricas da esfericidade determinada pela aplicação de regressão não-linear com adaptação de software a dados experimentais. O fator de forma ϕ é definido como:

$$\phi = \frac{s}{S_{SPH}} \quad (3.75)$$

Onde s é a área de superfície de uma esfera contendo o mesmo volume da partícula, e S_{sph} é a área de superfície real da partícula.

3.3.4 Transferência de calor entre gás-partícula

A transferência de calor entre as fases gasosas e sólidas é governada pelo balanço de calor de três mecanismos de transferência de calor: transferência de calor por convecção Q_C , transferência de calor latente associada à transferência de massa Q_M e transferência de calor por radiação Q_R (SHIOZAWA, 2013).

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = -S_h = Q_C + Q_M + Q_R \quad (3.76)$$

A transferência de calor convectiva é calculada pela Eq. (3.77):

$$Q_C = \pi d_p \lambda N_u (T_g - T_p) \quad (3.77)$$

Onde T_p e T_g são a temperatura da partícula e do gás respectivamente, λ é a condutividade térmica do fluido e N_u é o número de Nusselt dado por:

$$N_u = 2 + 0,6Re^{0,5}Pr^{1/3} \quad (3.78)$$

O número de Prandtl é dado por:

$$Pr = \mu \frac{c_p}{\lambda} \quad (3.79)$$

Onde μ é a viscosidade dinâmica e c_p é o calor específico à pressão constante. O calor é igualmente distribuído entre a fase gasosa e particulada.

A transferência de calor associada com a transferência de massa é dada por:

$$Q_M = \sum \frac{dm_p}{dt} H_{reac} \quad (3.80)$$

A somatória é tomada sobre todos os componentes das partículas para as quais a transferência de calor é realizada, onde m_p é a massa de partículas e H_{reac} é a perda ou ganho

de calor pelas reações, incluindo a perda de calor durante a devolatilização e a gaseificação do *char* e o ganho de calor devido à oxidação do *char*. A transferência de calor por radiação utilizado neste trabalho é o modelo de radiação por Ordenadas Discretas (DO). Alguns autores que utilizaram este modelo de transferência de calor por radiação são (CENTENO, 2015; GIDDINGS, 2000).

3.3.4.1 Modelo de radiação por Ordenadas Discretas

A equação da transferência por radiação para um meio absorvendo, emitindo e espalhando radiação na posição \vec{r} e na direção \vec{s} é:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (3.81)$$

O modelo de radiação por ordenadas discretas resolve a (Eq. 3.81) para um número finito de ângulos sólidos discretos, cada um deles associado a um vetor de direção \vec{s} fixo no sistema cartesiano global (x, y, z), portanto é possível controlar a finura da discretização angular (ANSYS, 2017). O modelo de ordenadas discretas considera a Eq. (3.81) na direção \vec{s} como uma equação de campo. Assim, esta equação pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s})\vec{s}) + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (3.82)$$

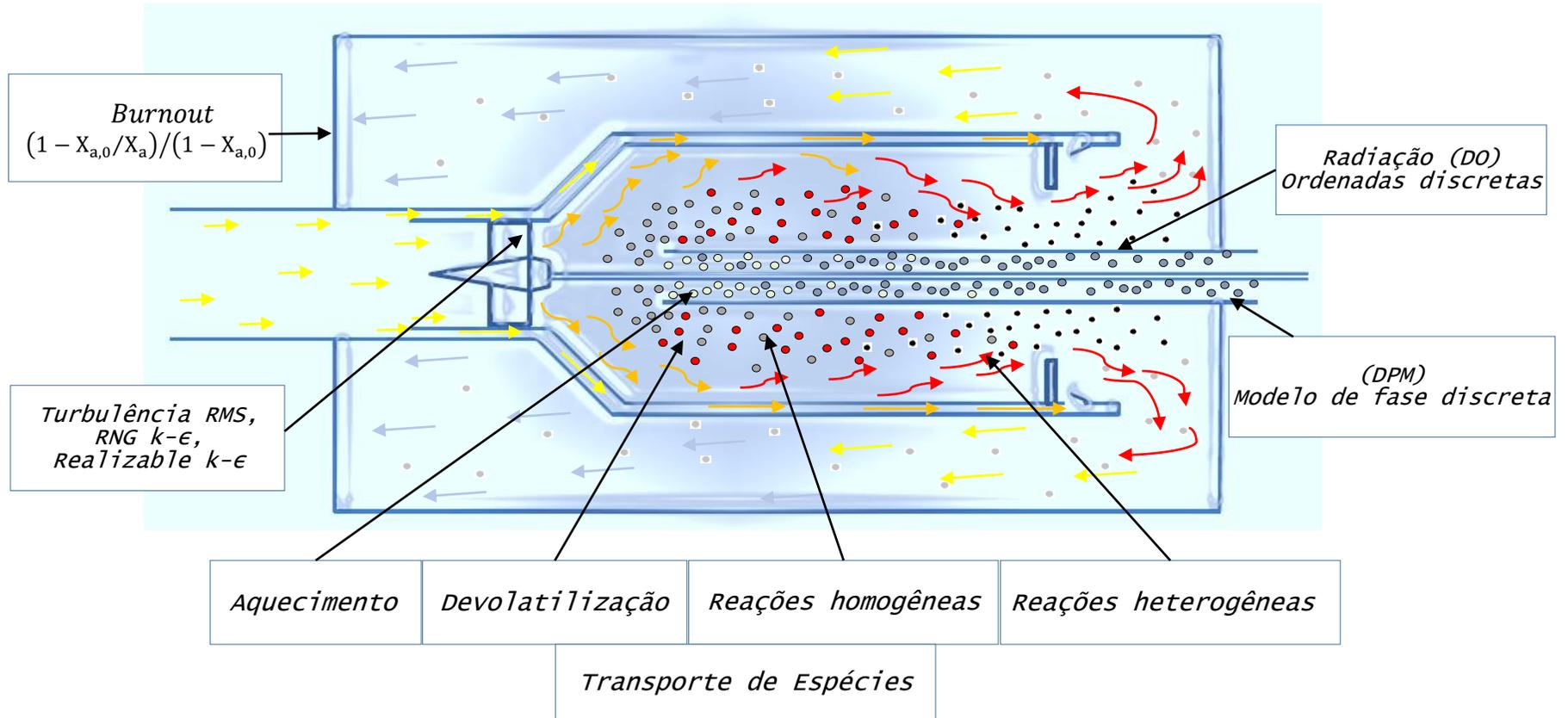
O modelo de ordenadas discretas permite incluir o efeito das partículas sobre a radiação. Neste caso, ANSYS FLUENT considera desprezíveis todas as outras fontes de dispersão na fase gasosa. A contribuição da fase discreta de partículas aparece na Eq. (3.83) como:

$$\nabla \cdot (I\vec{s}) + (a + a_p + \sigma_p)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (3.83)$$

Onde a_p é o coeficiente de absorção equivalente devido à presença de partículas, E_p é a emissão equivalente e σ_p é o fator de espalhamento equivalente da partícula.

Finalmente, utilizando a Figura 3.4, se realiza um resumo dos principais modelos que representam a combustão e fluidodinâmica do escoamento na câmara de combustão ciclônica.

Figura 3.4- Modelos escolhidos para as simulações da câmara de combustão ciclônica.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Capítulo 4

CINÉTICA QUÍMICA E PROPRIEDADES FÍSICAS DO BAGAÇO DE CANA-DE-AÇÚCAR

Para conseguir resultados satisfatórios em simulações de combustão utilizando partículas de biomassa, precisa-se de dados de cinética química e propriedades físicas para serem utilizados nas equações de cada um dos sub-processos que experimentam as partículas de biomassa e que foram descritos no Capítulo 3 deste texto.

4.1 Introdução

O bagaço de cana-de-açúcar não é um material homogêneo. Após a pulverização do bagaço as frações maiores são fibrosas e aparentam formas cilíndricas, enquanto as frações menores são de forma mais esféricas (LUO E STANMORE, 1992). Estas características morfológicas como tamanho, superfície externa e forma geométrica são próprias do bagaço e outros combustíveis sólidos, portanto a sua conversão térmica é mais complexa do que aqueles combustíveis de fase homogênea, por exemplo, gases e líquidos (CENTENO, 2015).

Entende-se que dados de cinética química de combustíveis sólidos são mais difíceis de conseguir e determinar, principalmente porque estes tipos de dados devem estar baseados em resultados experimentais realizados em condições próximas ou iguais aos processos reais a serem representados, o que envolve elevadas temperaturas e elevadas taxas de aquecimento, principalmente no que se refere aos processos de combustão.

Um dos parâmetros cinéticos mais importantes da combustão é a energia de ativação E_a , um parâmetro utilizado para prever o comportamento térmico de um material e representa o valor mínimo de energia necessária para que uma reação inicie. Desta forma,

quanto menor o valor de energia de ativação, menor é o consumo de energia para iniciar a reação e melhor é o processo (RIBEIRO, 2017).

A determinação dos parâmetros cinéticos como a energia de ativação é realizado por técnicas de análise térmica. Técnicas como a calorimetria diferencial por varredura (DSC) e a termogravimetria (TG) são significativamente vantajosas pela sua simplicidade preparatória da amostragem e adequados para qualquer reação na qual existe uma perda ou ganho de massa (RIBEIRO, 2017). A variação da massa em função da temperatura gera uma curva, denominada curva TG, que fornece informações sobre a estabilidade térmica e composição da amostra. Outros métodos são derivados dos resultados da termogravimetria, como a termogravimetria derivada (DTG), onde a curva obtida corresponde à primeira derivada da curva TG. Através das curvas DTG é possível identificar os eventos pelos picos de temperatura. Estes picos apresentam área proporcional à alteração de massa na amostra, permitindo observar a intensidade do evento de perda de massa (IONASHIRO *et al.* 2012). De forma similar, a análise térmica diferencial (DTA) mede o diferencial de temperatura entre uma amostra e um material de referência em função da temperatura ou do tempo. Através da curva DTA é possível observar o efeito do calor associado a alterações na amostra, resultado de um processo endotérmico ou exotérmico (IONASHIRO *et al.* 2012).

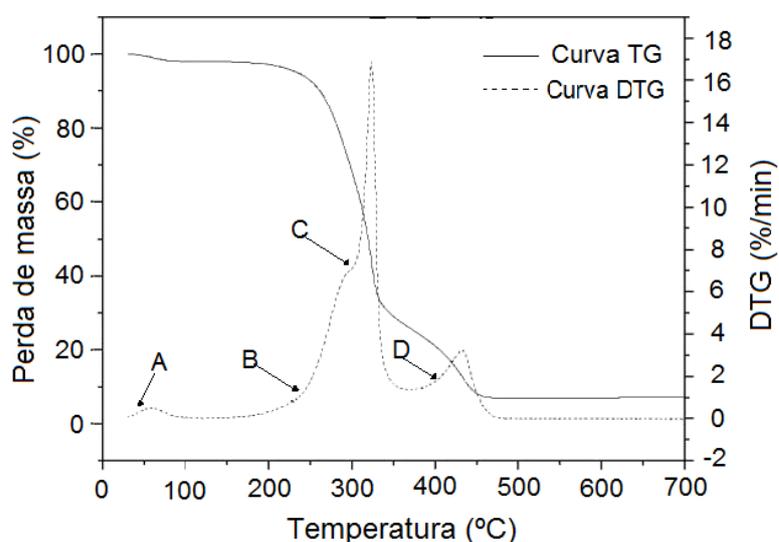
Em geral, o processo completo de determinação de dados cinéticos químicos consiste na realização de medições em ensaios experimentais do material combustível, utilizando as técnicas de análise térmica descritas anteriormente, seguido da análise matemática dos resultados. Experimentalmente são empregados os métodos isotérmicos ou não isotérmicos, enquanto as abordagens matemáticas empregadas podem ser divididas em métodos de ajuste de modelo e modelos livres de ajuste ou isoconversionais (CENTENO, 2015; RAMAJO-ESCALERA *et al.* 2006). Informação adicional com relação ao procedimento para obtenção de dados de cinética química por técnicas de análise térmica é descrita no Anexo A deste texto.

Alguns autores como Aboyade *et al.* (2011) asseguram que a curva TG de uma amostra de material lignocelulósico, corresponde aproximadamente à superposição das curvas TG dos seus pseudo componentes (celulose, hemicelulose e lignina) nas suas respectivas proporções. Um exemplo de uma curva TG e DTG em atmosfera oxidante é ilustrada na Figura 4.1 e correspondem ao bagaço de cana-de-açúcar obtidas no trabalho de

Ribeiro (2017). Um breve estudo destas curvas pode ajudar a compreender melhor as características da decomposição térmica deste combustível.

Segundo Mortari *et al.* (2010) em materiais lignocelulósicos a decomposição ocorre em quatro etapas, como ilustra a Figura 4.1. O primeiro evento (A) sinalizado na curva DTG, está associado à perda de umidade do material e ocorre em torno de 100 °C. O segundo evento (B) refere-se ao início da decomposição da hemicelulose e lignina. A decomposição térmica da hemicelulose iniciou em 200 °C e da celulose em 285 °C, a taxa máxima de decomposição da celulose ocorreu em 325 °C. O terceiro evento (C) refere-se à decomposição da celulose. A lignina se decompõe em uma ampla faixa de temperaturas e no evento (D) verifica-se que a decomposição da lignina residual teve início em aproximadamente 380 °C e a decomposição completa do material ocorreu em 460 °C (RIBEIRO, 2017). De acordo com Klass (1998), a celulose e hemicelulose de materiais lignocelulósicos são constituídas por produtos voláteis e a lignina é a responsável pela formação do *biochar*.

Figura 4.1- Curvas TG e DTG do bagaço de cana-de-açúcar em atmosfera oxidante.



Fonte: Adaptado de Ribeiro (2017).

A hemicelulose tem baixa estabilidade térmica e sua decomposição ocorre em temperaturas menores. O pico seguido do ombro da hemicelulose corresponde à decomposição de celulose que é o principal componente da parede celular da biomassa (RIBEIRO, 2017). Após a decomposição térmica da hemicelulose e celulose foi observado o evento de decomposição da lignina residual. A lignina é um componente de reforço da

parede da célula da biomassa e se decompõe gradualmente entre 137 °C e 667 °C (ZHOU *et al.*, 2016). A lignina apresenta uma estrutura complexa, o que o torna termicamente mais estável do que a hemicelulose e a celulose, dessa forma a sua total decomposição ocorre em temperaturas mais elevadas (RIBEIRO, 2017).

4.2 Parâmetros cinéticos para o bagaço de cana-de-açúcar

Abordando exclusivamente estudos de análise térmica do bagaço de cana-de-açúcar, com o objetivo de encontrar dados de cinética química, foram encontrados na literatura quatro trabalhos mais representativos. Estes trabalhos foram escolhidos porque considera-se que os dados proporcionados por eles são os mais completos e se adequam a certos requerimentos que são importantes para o caso deste trabalho, como por exemplo, o tamanho das partículas de bagaço utilizados e porque o bagaço foi produzido em território brasileiro. Em seguida descreve-se brevemente estes trabalhos utilizados.

No estudo de Zanatta *et al.* (2016) as amostras de bagaço de cana-de-açúcar foram coletadas da parte noroeste do Estado do Paraná. Para a secagem, o material foi exposto à temperatura ambiente de 30 °C por 24 horas, e posteriormente foi processado em um moinho de corte e passado na peneira. Para as análises elementares de poder calorífico superior, composicional e análise termogravimétrico foram usadas partículas com diâmetro compreendido entre 0,080 e 0,60 mm. Os testes de termogravimetria foram realizados em atmosfera de nitrogênio puro (N₂ – 99.999 %) desde temperatura ambiente até 900 °C para taxas de aquecimento de 5, 10, 15, 20 e 30 C/min. Na Figura A.1 do Anexo A deste texto, podem-se verificar as curvas TG obtidas. Na Tabela 4.1 tem-se informações dos resultados obtidos no estudo para a análise imediata, análise elementar e valor do poder calorífico superior do bagaço de cana-de-açúcar.

Ramajo-Escalera *et al.* (2006) realizaram um estudo para determinar parâmetros cinéticos para a oxidação do bagaço de cana-de-açúcar usando a metodologia da cinética livre de modelo de Vyazovkin. As amostras de bagaço de cana utilizadas foram obtidas da usina Cruz Alta do município de Olímpia no Estado de São Paulo. Estas amostras foram secas em um forno a 105 °C por 3 horas, com umidade em equilíbrio próximas ao do bagaço em contato com o ar ambiente. Após a secagem, o material foi classificado em duas frações: fibras e pó. As amostras utilizadas na análise foi do tipo pó de bagaço de cana. Sua composição química elementar obtida está dada na Tabela 4.1. Para as medições cinéticas

os experimentos TG foram realizados em atmosfera de oxigênio a taxas de aquecimento de 5, 10 e 20 °C/min. Na Figura A.1 mostram-se as curvas TG desse estudo.

No estudo de Ribeiro (2017) foi realizado a investigação do comportamento da combustão de amostras de carvão mineral, bagaço de cana-de-açúcar, bagaço de sorgo biomassa e misturas de carvão-biomassa através da análise termogravimétrica. As amostras de bagaço de cana foram coletadas da usina Açucareira da Serra S.A. localizada na cidade de Ibaté no Estado de São Paulo. As amostras recebidas foram previamente secas em estufa por 12 horas na temperatura de 70 °C. Para uniformizar a granulometria dos materiais foi feita a moagem das amostras de bagaço, e posteriormente passada por peneiras para selecionar a granulometria média das partículas de 63 µm. Foram realizadas também a caracterização físico-química dos materiais por análise elementar, análise imediata, poder calorífico superior, porosimetria e morfologia das amostras. As informações obtidas dessas análises são dadas na Tabela 4.1. Para a análise térmica foram realizados testes de Termogravimetria (TG), Termogravimetria Derivada (DTG) e Análise Térmica Diferencial (DTA). Foram usadas taxas de aquecimento de 10, 15 e 20 °C/min. Na Figura do apêndice A.1 são mostradas as curvas obtidas dos testes termogravimétricos.

Tabela 4.1- Análise imediata e elementar do bagaço de cana-de-açúcar de diferentes estudos.

Parâmetro	Bagaço Ribeiro, (2017)	Bagaço Zanatta et al., (2016)	Bagaço Ramajo- Escalera et al., (2006)	Bagaço Centeno, (2015)	Bagaço Luo e Stanmore (1992)	Char bagaço Luo e Stanmore (1992)
PCS (MJ kg ⁻¹)	17,33	-	-	15,64	-	-
<i>Análise imediata</i>	<i>(wt% ar)</i>	<i>(wt% ar)</i>		<i>(wt% ar)</i>		
Umidade	4,8	7,23	-	9,80	7,6	5,0
Material volátil	78,5	82,50	-	73,77	84,3 (db)	5,8 (db)
Carbono fixo	9,8	9,34	-	14,87	12,3 (db)	82,1 (db)
Cinzas	6,9	0,93	-	1,56	3,4 (db)	12,1 (db)
<i>Análise elementar</i>	<i>(wt% db)</i>	<i>(wt% db)</i>	<i>(wt% daf)</i>	<i>(wt% daf)</i>	<i>(wt% daf)</i>	<i>(wt% daf)</i>
Carbono	43,53	35,73	45,4	44,73	51,7	96,3
Hidrogênio	5,62	7,05	5,3	6,12	6,3	1,0
Nitrogênio	0,43	0,41	1,5	6,66	-	2,4
Oxigênio*	43,52	56,81	47,8	40,32	42,0	0,0
Enxofre	-	-	-	2,17	-	0,3
Diâmetro médio (µm)	63	80–600	-		140,0	70,0
<i>Análise por componentes de biomassa (wt % db)</i>						
Celulose	-	42,8	-	-	-	-
Hemicelulose	-	27,6	-	-	-	-
Lignina	-	26,4	-	-	-	-

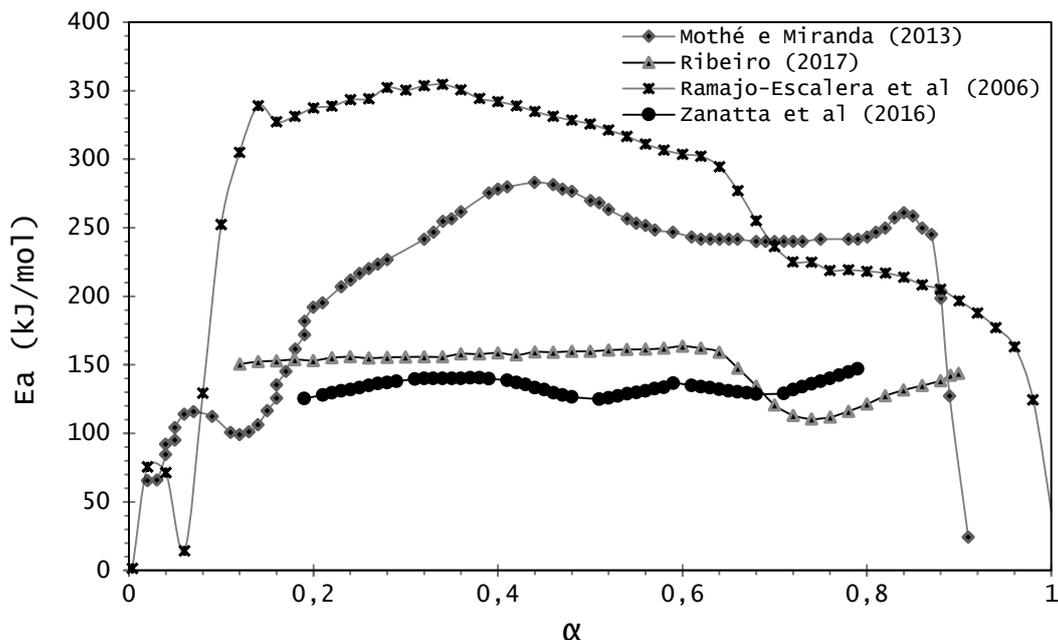
* Calculada por diferença

As amostras de bagaço e palha de cana-de-açúcar utilizadas no estudo de Mothé e De Miranda (2013) foram da cidade de Campinas do Estado de São Paulo. A preparação dos materiais envolveu as etapas de secagem por 24 horas à temperatura de 60 °C, e posteriormente à moagem do bagaço e palha de cana-de-açúcar em um moinho granulador, acoplada a uma peneira de 2 mm. Em termos de tamanho as amostras utilizadas foram homogêneas para obter resultados mais precisos. A decomposição térmica do bagaço e da palha da cana-de-açúcar foi realizada na faixa de temperatura de 30 a 800 °C em atmosfera de nitrogênio. As taxas de aquecimento usadas foram de 5, 10, 15 e 20 °C/min. Na Figura A.1 podem-se observar as curvas TG obtidas nesse estudo.

Os autores dos trabalhos citados acima utilizaram diferentes métodos matemáticos para encontrar a energia de ativação E_a e fator pré exponencial A . Mothé e De Miranda (2013) utilizaram os modelos isoconversionais de Friedman e OFW para determinar esses parâmetros cinéticos, as Figuras 4.2 e 4.3 mostram as curvas obtidas. Por sua vez, Ramajo-Escalera *et al.* (2006) utilizaram a metodologia livre de ajuste de modelo proposta por Vyazovkin e Wight (1997). A curva da energia de ativação em função do grau de decomposição encontrada por eles é mostrada na Figura 4.2. Ribeiro (2017) utilizou o método livre de modelo proposto por Vyazovkin e Wight (1997). A curva encontrada para a energia de ativação é mostrada na Figura 4.2. No trabalho de Zanatta *et al.* (2016), os parâmetros cinéticos foram estimados pelos métodos de OFW e pelo método de Kissinger. Os valores obtidos para a energia de ativação e fator pré exponencial pelo método de OFW estão plotados na Figura 4.2 e 4.3 respectivamente, e pelo método de Kissinger os valores da energia de ativação estão em torno de 124,54 kJ/mol.

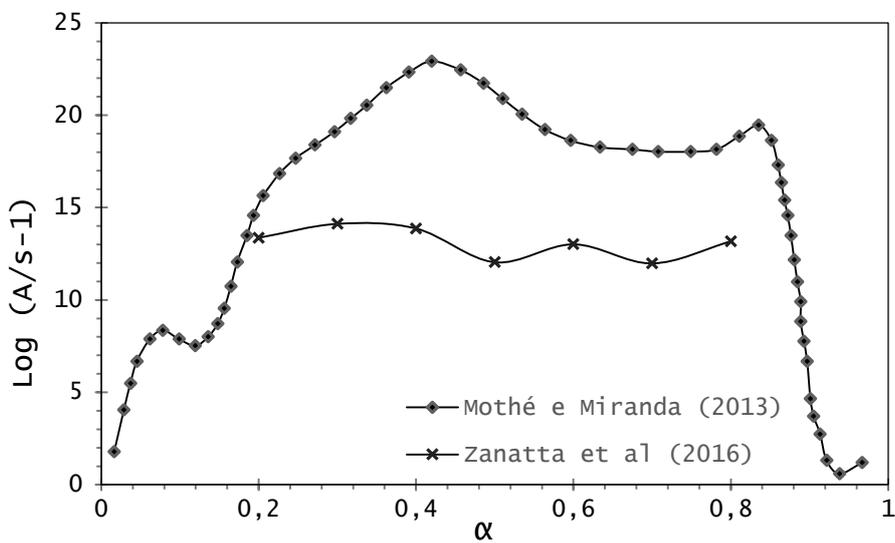
Observa-se por exemplo que na curva de energia de ativação obtida por Ribeiro, (2017) os valores de E_a permanecem praticamente constantes ao valor de 150 kJ/mol até 65 % de conversão, e logo observa-se uma redução da E_a . Estes eventos ocorrem entre as temperaturas de 350–425 °C e coincidem com os eventos da decomposição da celulose e o início da decomposição da lignina residual.

Figura 4.2 - Energia de ativação E_a em função do grau de conversão das partículas (α).



Fonte: Adaptado de Mothé e De Miranda (2013); Ribeiro (2017); Ramajo-Escalera *et al.* (2006); Zanatta *et al.* (2016).

Figura 4.3- Fator pré-exponencial ($\log A$) em função do grau de conversão da partícula (α).



Fonte: Adaptado de Mothé e De Miranda (2013); Zanatta *et al.* (2016).

De forma geral, comparando as quatro curvas da energia de ativação na Figura 4.2 vê-se que as curvas obtidas por Ramajo-Escalera *et al.* (2006) e Mothé e De Miranda (2013) têm valores elevados de E_a durante a devolatilização e combustão do *char*. Já os trabalhos de Ribeiro (2017) e Zanatta *et al.* (2016) apresentam valores mais baixos, e o comportamento

das curvas são similares. Provavelmente, esta diferença entre estes pares de curvas se deve ao tamanho das partículas utilizadas, Ribeiro utilizou partículas com tamanho médio de 63 μm e Zanatta *et al.* (2016) partículas de 80-600 μm . Entretanto, Mothé e De Miranda (2013) utilizaram partículas com tamanho médio de 2 mm e Ramajo-Escalera *et al.* não informaram o tamanho, mas foi considerada como pó de bagaço. Considerando que fatores como o tamanho, superfície externa e forma geométrica são fatores que influenciam nas reações de conversão, porque estão relacionados à difusão do oxidante para dentro da partícula.

Por outro lado, Centeno (2015) determinou dados cinéticos da devolatilização do bagaço e palha de cana-de-açúcar utilizando o modelo de OFW. Segundo Centeno, o bagaço e a palha de cana-de-açúcar possuem composição química similar à da madeira e outros materiais lignocelulósicos, pelo qual se pode supor que o seu comportamento no processo de pirólise é similar, ou seja, o processo acontece à taxas diferentes dependendo do grau de decomposição. Portanto, o modelo de devolatilização é melhor representado por um conjunto de trios cinéticos e não só um trio cinético.

Mantendo esse conceito, Centeno (2015) encontrou dados cinéticos para a devolatilização em intervalos da fração de decomposição das partículas do bagaço α . Na Tabela 4.2 mostra-se os valores por ele obtidos. A composição de uma das amostras de bagaço de cana-de-açúcar utilizadas nesse estudo é dada na Tabela 4.1. Para a obtenção das curvas TG foram configuradas taxas de aquecimento de 5, 10 e 15 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$. Ele utilizou o método de OFW para testar entre 17 modelos de reação e os modelos que melhor se ajustam aos dados, e seu respectivo intervalo de aplicação são mostrados na Tabela 4.2. Os modelos de reação referentes a $f(\alpha)$ fazem menção ao fato de que a taxa de conversão cinética para uma reação elementar de estado sólido depende da formação de núcleos, avanço da interface, difusão ou da forma geométrica da partícula sólida. Para tal caso, Centeno utilizou modelos de reação de segunda e terceira ordem.

Centeno explica que a devolatilização é o sub-processo mais importante quando se utiliza biomassa pela quantidade de material volátil que estes materiais contém, portanto este sub-processo deve ser modelado de uma forma mais precisa, e afirmou que o modelo de devolatilização desenvolvido no FLUENT (para carvão) não representa adequadamente o sub-processo. Portanto, ele programou funções definidas pelo usuário (UDFs) para a devolatilização do bagaço de cana-de-açúcar.

Tabela 4.2- Dados cinéticos para a devolatilização do bagaço de cana-de-açúcar.

<i>Intervalo da fração de conversão da partícula do bagaço $\alpha = (0,0 - 0,6)$</i>	
E_a [J/kmol]	$65,1737 \times 10^3$
A [s ⁻¹]	$88,6552 \times 10^3$
$f(\alpha)$	Segunda ordem
Equação da devolatilização	$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}(1 - \alpha)^2$
<i>Intervalo da fração de conversão da partícula do bagaço $\alpha = (0,6 - 1,0)$</i>	
E_a [J/kmol]	$60,8980 \times 10^3$
A [s ⁻¹]	$64,5617 \times 10^3$
$f(\alpha)$	Terceira ordem
Equação da devolatilização	$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}(1 - \alpha)^3$

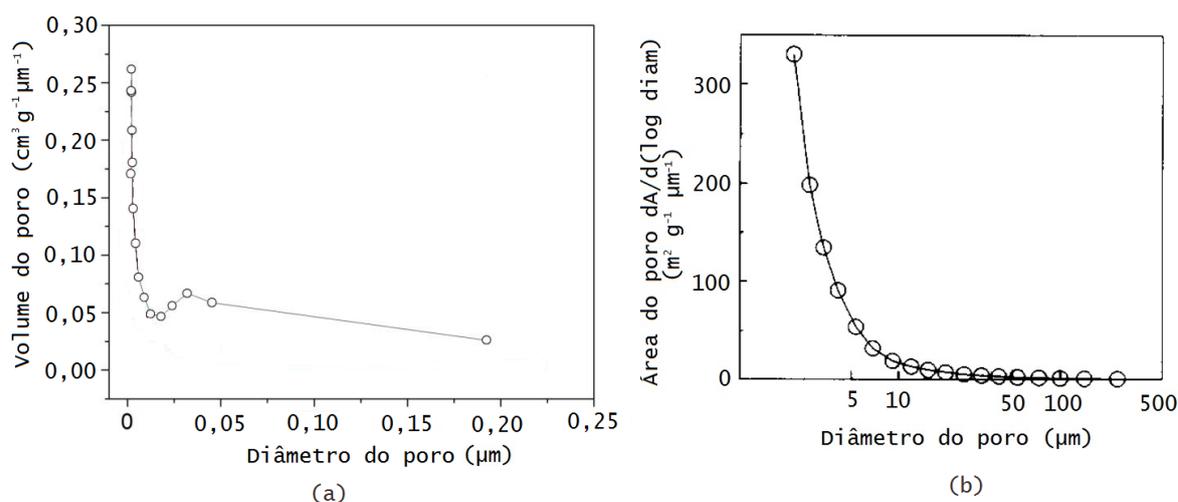
Fonte: Dados de Centeno (2015).

4.2.1 Cinética da combustão do *char* do bagaço

O artigo de Luo e Stanmore (1992) reporta a cinética de combustão do *char* do bagaço pulverizado determinado por análise de termogravimetria. As amostras do *char* foram obtidas quando amostras de bagaço de cana-de-açúcar com tamanhos compreendidos entre 90 - 125 μm foram submetidas ao processo de pirólise em testes de material volátil, segundo a norma ASTM, e a cinética da combustão do *char* foi avaliada usando técnicas de DTG. Foi utilizado bagaço australiano e as análises imediata e elementar do bagaço e do *char* do bagaço obtidas são reportadas na Tabela 4.1. A energia de ativação do *char* do bagaço encontrada foi de 180 kJ/mol e a ordem de reação com relação ao oxigênio foi de 0,65. Os resultados também indicam que em faixas de temperatura compreendidas entre 450-550 °C a reação de combustão ocorreu em regime II com módulo de Thiele na faixa de 470-3100 e $\eta \ll 1,0$. Portanto, como o Thiele $\gg 1$ a difusão dos poros tem um forte efeito limitador na taxa de reação e a combustão ocorre no regime II.

Com relação à área de superfície externa dos poros do *char*, considerando um diâmetro de poro aparente maior de 6 μm foi aproximadamente de 80 m²g⁻¹. Enquanto a área e volume dos microporos (< 6 μm) foi de 330 m²g⁻¹ e 0,15 cm³g⁻¹, respectivamente. A Figura 4.4 mostra dados da porosidade de partículas de bagaço e *char* do bagaço de cana-de-açúcar.

Figura 4.4- Distribuição do diâmetro de poros (a) bagaço e (b) *char* do bagaço de cana-de-açúcar.



Fonte: Adaptado de Ribeiro (2017); Luo e Stanmore (1992).

Segundo Luo e Stanmore (1992) a energia de ativação é influenciada pelo modo de combustão, é dizer se a oxidação é uniforme através da partícula ou não. Isto pode ser determinado pelo cálculo do Módulo de Thiele e pelo fator de eficiência de queima. O Módulo de Thiele é definido como a relação entre a taxa de reação global com a taxa de difusão interna, e o fator de eficiência é a relação da taxa de reação real a qual poderia ocorrer se todos os poros da superfície interna da partícula fossem expostas ao oxigênio, nas mesmas condições que os poros da superfície externa da partícula. Um Módulo de Thiele elevado implica que a reação foi confinada à superfície externa e a eficiência de queima é baixa. Quando o fator de eficiência é menor que 1, parte da superfície interna não está sendo utilizada. Isto é conhecido como regime de combustão II, o qual é encontrado em carvões reativos. Nas suas conclusões, Luo e Stanmore (1992) afirmam que o *char* do bagaço é similar ao *char* do carvão lignite (*brown coal*) em relação às suas propriedades de combustão. A saber, o *char* de carvões de baixa qualidade tem energias de ativação nas faixas de 100-167 kJ/mol.

Realizada a revisão de trabalhos de análise térmica de partículas de bagaço de cana-de-açúcar para a obtenção de dados cinéticos, na Tabela 4.3 se informam os dados de cinética química escolhidos. Os dados cinéticos para a devolatilização foram obtidas do trabalho de Centeno (2015) e para a combustão do *char* utilizou-se os dados de Luo e Stanmore (1992).

Tabela 4.3- Dados cinéticos configurados nas simulações das câmara de combustão ciclônica.

Processo	Reação	Expressão da taxa de reação	Cinética da reação	Ref.
Secagem	$H_2O(l) \rightarrow H_2O(g)$	$N_i = k_c(C_{i,s} - C_{i,\infty})$	Difusão controlada	ANSYS-FLUENT
Desvolatilização	bagaço $\xrightarrow{k_1} \alpha_1 \text{Voláteis}_1 + (1 - \alpha_1) \text{Char}_1$ $\xrightarrow{k_2} \alpha_2 \text{Voláteis}_2 + (1 - \alpha_2) \text{Char}_2$	$\frac{dVM}{dt} = (\alpha_1 k_1 - \alpha_2 k_2)$ $k_i = A_i \exp\left(-\frac{E_{ai}}{RT_p}\right)$	$A_1 = 88,6552 \times 10^3 (s^{-1})$ $E_{a1} = 65,1737 \times 10^6 (J \cdot kmol^{-1})$ $A_2 = 64,5617 \times 10^3 (s^{-1})$ $E_{a2} = 60,8980 \times 10^6 (J \cdot kmol^{-1})$ $\alpha_1 = VM(daf);$ $\alpha_2 = 1,1\alpha_1 + 0,14$	CENTENO, (2015)
Reações homogêneas	$vol + 0,5O_2 \rightarrow 0,69CO + 0.2003CO_2 + 0.7062H_2O + 0.0038N_2$	$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT_p}\right)$ $r_i = C_A \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{[i]}{v_i'}\right)$	$A = 2,1190 \times 10^{11} (s^{-1})$ $E_a = 2,027 \times 10^8 (J \cdot kmol^{-1})$	ANSYS-FLUENT
	$CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$		$A = 2,239 \times 10^{12} (s^{-1})$ $E_a = 1,6736 \times 10^8 (J \cdot kmol^{-1})$ $[i] = [CO]^1 [O_2]^{0,25}$	
	$H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$		$A = 9,87 \times 10^8 (s^{-1})$ $E_a = 3,10 \times 10^7 (J \cdot kmol^{-1})$ $[i] = [H_2]^1 [O_2]^1$	
Reações heterogêneas	$C(s) + 0,5O_2 \rightarrow CO$	$R = n \frac{d_p}{6} \rho_p A_g k_i$ $k_i = A_c \exp\left(-\frac{E_c}{RT_p}\right)$	$A_c = 300 (s^{-1})$ $E_{ac} = 1,80 \times 10^8 (J \cdot kmol^{-1})$	LUO e STANMORE, (1992)
	$C(s) + CO_2 \rightarrow 2CO$		$A_c = 22,12 (s^{-1})$ $E_{ac} = 2,20 \times 10^8 (J \cdot kmol^{-1})$	
	$C(s) + H_2O \rightarrow CO + H_2$		$A_c = 4354,6 (s^{-1})$ $E_{ac} = 1,42 \times 10^8 (J \cdot kmol^{-1})$	

Fonte: Elaborado pelo autor a partir de Centeno (2015); Luo e Stanmore (1992); Westbrook e Dryer (1981); Ye e Zhang (1998); ANSYS FLUENT.

Os dados do trabalho de Centeno (2015) foram escolhidos porque foram obtidos exclusivamente para o sub-processo da devolatilização e também porque ele realizou simulações em ANSYS FLUENT da queima de bagaço em uma caldeira industrial utilizando esses dados cinéticos. No entanto, dependendo dos resultados, nas simulações podem ser utilizadas os valores de Ribeiro (2017) e Zanatta *et al.* (2016), porque considera-se adequados pelo tamanho de partícula utilizada na obtenção dos dados cinéticos, e porque os valores de E_a são razoáveis quando comparadas com carvões de baixa qualidade, por exemplo.

4.3 Propriedades físicas das partículas de bagaço de cana-de-açúcar

O conhecimento das propriedades físicas de um material combustível é muito importante quando se trabalha com combustão. Em simulações, os bons resultados dependem dos valores configurados para essas propriedades. Logo, as propriedades físicas mais relevantes ou mais utilizadas em modelos de combustão são: a massa específica, calor específico, tamanho das partículas, teor de umidade, esfericidade, porosidade, entre outros. Da mesma forma, para a previsão das trajetórias da fase discreta e a transferência de calor e massa, requer-se entradas de muitas propriedades físicas em ANSYS FLUENT.

Com relação às simulações da câmara de combustão, as propriedades físicas mais importantes configuradas em ANSYS FLUENT foram investigadas em diferentes fontes de referências disponíveis na literatura. Proenza *et al.* (2016) fizeram um estudo do comportamento fluidodinâmico de partículas de bagaço de cana-de-açúcar e reportaram as medições de algumas das propriedades físicas do bagaço de cana-de-açúcar. O bagaço utilizado foi de várias regiões de São Paulo e foram realizadas medições para diferentes tamanhos de partículas, as informações mostradas na Tabela 4.4 foram de partículas de tamanho médio de 75 μm .

Tabela 4.4- Propriedades físicas do bagaço de cana-de-açúcar.

Parâmetro	Correlação/valor	Unidades	Ref.
Massa específica a granel	$\rho_{bulk} = 147,80$	kg/m ³	PROENZA <i>et al.</i> (2017)
Massa específica aparente	$\rho_p = 484,63$	kg/m ³	
Massa específica real	$\rho_r = 2221,14$	kg/m ³	
Porosidade	$p_s = 0,727$	-	
Esfericidade	$\phi = 0,55$	-	
Massa específica do <i>char</i>	$\rho_c = 290,0$	kg/m ³	ZAHIROVICH <i>et al.</i> (2004)
Área de superfície do poro do <i>char</i>	$A_{poro} = 330$	m ² /g	LUO e STANMORE, (1992)
Diâmetro médio do poro do <i>char</i>	$D_{poro} = 6$	µm	
Emissividade da partícula *	$\varepsilon_p = 0,8$	-	KLEINHANS <i>et al.</i> (2017)
Condutividade térmica da partícula *	$k_p = 0,25$	W/m °C	
Temperatura de vaporização da partícula	$T_{vap} = 213$	°C	CENTENO (2015)
Temperatura de vaporização da água	$T_{vap} = 25$	°C	ANSYS-FLUENT
Ponto de ebulição da água	$T_{boil} = 100$	°C	
Componente de fração volátil (%)	$f_{v,0} = 82,45$	%	
Difusividade binária	$D_{iff} = 4 \times 10^{-05}$	(m ² /s)	
Coeficiente de <i>swelling</i>	$C_s = 1,4$	-	
Relação estequiométrica não queimada	2,67	-	
Fração combustível (<i>char</i>)	$f_c = 10,26$	(%)	

* valores assumidos a partir de carvão betuminoso.

Uma propriedade física muito importante em combustão é o calor específico do material combustível. O modelo DPM de ANSYS FLUENT está baseado em calores específicos constantes tanto da água líquida $c_{p,w}$, quanto da partícula sólida seca $c_{p,dw}$. Durante o aquecimento inicial e secagem, o calor específico da partícula úmida é calculada como uma fração de massa média dos calores específicos $c_{p,w}$ e $c_{p,dw}$. Para os estágios de devolatilização, combustão do *char* e aquecimento/resfriamento final das cinzas remanescentes o DPM original aplica um valor constante, $c_{p,dw}$ (ZAHIROVIC *et al.* 2004).

No entanto, em aplicações reais o valor do calor específico de uma partícula sólida varia com a temperatura da partícula e com o estágio de conversão. Zahirovic *et al.* (2004) fizeram simulações da combustão de biomassa pulverizada em um forno usando a abordagem de calores específicos variáveis para cada sub-processo da conversão, onde uma fração de massa média dos calores específicos $c_{p,w}$ e $c_{p,dw}$ fornece o valor do calor específico

da partícula no estágio de secagem. Durante a devolatilização, assume-se que o calor específico da partícula varia linearmente entre valor do calor específico da biomassa seca $c_{p,dw}$ e a do *char* $c_{p,c}$. Durante a combustão do *char*, o calor específico da partícula segue a variação linear entre o calor específico do carvão residual, $c_{p,c}$ e o da cinza $c_{p,a}$. Em ambos os casos é introduzido um fator de interpolação η_i , o qual relaciona a parte não convertida da massa das partículas com a massa total de partículas, que pode ser convertida em um certo estágio da conversão.

Desta forma, entende-se que melhores resultados podem ser obtidos se o calor específico fosse variável com relação à temperatura. No entanto, não foram encontrados na literatura valores medidos de calores específicos do bagaço de cana-de-açúcar úmido e seco. Portanto, foram assumidas a partir de outros materiais de biomassa semelhantes. A Tabela 4.5 resume as relações utilizadas na abordagem de Zahirovich *et al.* (2004) para calores específicos e que foram utilizados na combustão de madeira pulverizada.

As correlações para calores específicos dadas na Tabela 4.5 foram programadas como UDFs com a macro DEFINE_DPM_PROPERTY e logo compilados e configurados como entradas em FLUENT. Outras propriedades físicas além daqueles das informadas nas Tabelas 4.4 e 4.5 foram mantidas com os valores recomendados por ANSYS FLUENT.

4.4 Parâmetros básicos da combustão do bagaço de cana-de-açúcar

Esta seção apresenta um estudo teórico para estimar alguns dos parâmetros relacionados com a combustão de biomassa no combustor ciclônico. Os parâmetros de interesse são: excesso de ar de combustão, temperatura de chama adiabática, composição dos gases de combustão e tempo aproximado da evaporação da umidade e devolatilização. Os resultados dos cálculos obtidos neste estudo teórico podem ser aplicados para avaliar os resultados da simulação.

A relação ar-combustível, a temperatura de chama adiabática e a composição teórica dos gases de exaustão são parâmetros que podem ser calculados baseados na composição elementar do combustível e nas condições de operação da câmara de combustão (DA SILVA, 2013). Para o bagaço de cana-de-açúcar sabe-se por Centeno (2015) e Carvalho *et al.* (2018) que intervalos típicos de excesso de ar para a combustão estão compreendidos entre 1,25 e 1,45 dependendo do tipo de combustor utilizado. Com estas referências do excesso do ar para o bagaço, cálculos dos parâmetros de combustão foram realizados em

função do excesso de ar e utilizando os dados da composição elementar do bagaço para diferentes trabalhos como Ribeiro (2017), Centeno (2015) e Zanatta *et al.* (2016), dados na Tabela 4.1.

Tabela 4.5- Valores e correlações para o cálculo de calores específicos utilizados como entradas na solução das equações dos sub-processos na combustão das partículas.

Parâmetro	Correlação/valor	Unidades	Ref.
Calor específico da água líquida	$c_{p,w} = 4182$	J/kg K	ANSYS-
Calor específico das cinzas*	$c_{p,a} = 1100$	J/kg K	FLUENT
Calor específico da madeira seca**	$c_{p,dw} = 1500 + T_p$	J/kg K	GRØNLI,
Calor específico do <i>char</i> ***	$c_{p,c} = 420 + 2,09T_p + 6,85 \times 10^{-4} T_p^2$	J/kg K	(1996)
Aquecimento inicial			
Fonte de calor	$Q^{(aquecimento)} = 0$	W	ANSYS-
Calor específico do material úmido	$c_p = f_{w,0}c_{p,w} + (1 - f_{w,0})c_{p,dw}$	J/kg K	FLUENT
Secagem			
Fonte de calor	$Q^{(secagem)} = \frac{dm_p}{dt} h_w$	W	ANSYS-
Calor latente da água	$h_w = 2,263 \times 10^6$	J/kg	FLUENT
Calor específico do material úmido	$c_p = f_w c_{p,w} + (1 - f_w) c_{p,dw}$	J/kg K	
Devolatilização			
Fonte de calor	$Q^{(desv)} = \frac{dm_p}{dt} h_{vol}$	W	ANSYS-
Calor latente dos voláteis****	$h_{vol} = 0,0$	J/kg	FLUENT
Calor específico da matéria volátil	$c_p = \eta_1 c_{p,dw} + (1 - \eta_1) c_{p,c}$	J/kg K	
Fator de interpolação	$\eta_1 = \frac{m_p}{(1 - f_{w,0})f_{v,0}m_{p,0}}$	-	GRØNLI, (1996)
Combustão do char			
Fonte de calor	$Q^{(comb)} = \frac{dm_p}{dt} H_{reac}$	W	ANSYS-
Calor de reação para a queima	$H_{reac} = 3,2789 \times 10^7$	J/kg	FLUENT
Fração de calor absorb. pelo sólido	$f_h = 0,2$	-	
Calor específico do <i>char</i>	$c_p = \eta_2 c_{p,c} + (1 - \eta_2) c_{p,a}$	J/kg K	
Fator de interpolação	$\eta_2 = \frac{m_p}{(1 - f_{w,0})(1 - f_{v,0})m_{p,0}}$	-	GRØNLI, (1996)
Aquecimento/resfriamento das cinzas			
Fonte de calor	$Q^{(final)} = 0$	W	ANSYS-
Calor específico das cinzas	$c_p = c_{p,a}$	J/kg K	FLUENT

* o calor específico das cinzas é configurado como constante na definição padrão de ANSYS FLUENT, mas podem-se usar valores variáveis quando as cinzas são tratadas como sílica (SiO₂) ou carbonato de sódio (Na₂CO₃), por exemplo.

** correlação válida na faixa de temperaturas de 300-500 K

*** correlação válida na faixa de temperaturas de 273-1273 K.

**** assume que a devolatilização não é um processo endotérmico.

No caso da câmara de combustão ciclônica em estudo, como ele é parte de um ciclo de turbina a gás com queima externa (EFGT) e está acoplado a um trocador de calor a jusante e à saída da turbina a montante, este funciona com a mesma vazão mássica de ar que entra no ciclo da turbina. Portanto, os cálculos dos parâmetros de queima do bagaço de cana são realizados de forma inversa ao procedimento padrão, ou seja, tendo-se como dado a vazão mássica de ar de combustão e a composição elementar do bagaço pode-se determinar o excesso de ar com o qual funciona a câmara, e a partir dele se calcula os parâmetros de combustão como a temperatura de chama adiabática e composição teórica dos gases produtos da combustão. Então, a partir da vazão mássica do combustível e a composição elementar do bagaço obtém-se a reação de combustão utilizando, por exemplo, a composição elementar de Ribeiro (2017) em base úmida ou como recebida (*ar*) da Tabela 4.1.

$$C = \dot{m}_{bagaço} \frac{Y_{C,ar}}{M_C} \quad (4.1)$$

$$H_2 = \dot{m}_{bagaço} \frac{Y_{H,ar}}{M_{H_2}} \quad (4.2)$$

$$S = \dot{m}_{bagaço} \frac{Y_{S,ar}}{M_S} \quad (4.3)$$

$$O_2 = \dot{m}_{bagaço} \frac{Y_{O,ar}}{M_{O_2}} \quad (4.4)$$

$$N_2 = \dot{m}_{bagaço} \frac{Y_{N,ar}}{M_{N_2}} \quad (4.5)$$

$$0.002063C + 0.001598H_2 + 0.0S + 0.000773O_2 + 0.0000087N_2 + 0.002089\lambda O_2 + 0.007862\lambda N_2 \rightarrow \mathbf{0.002063CO_2 + 0.001598H_2O + 0.0SO_2 + 0.002089(\lambda - 1)O_2 + 0.007862\lambda N_2} \quad (4.6)$$

Sendo $Y_{k,ar}$ a fração mássica da espécie k no bagaço em base úmida (*ar*), M_k o peso molecular da espécie k , λ o valor do excesso de ar. As frações molares do oxigênio e do nitrogênio no ar atmosférico são $X_{O_2} = 0,21$ e $X_{N_2} = 0,79$, respectivamente. Do balanço do oxigênio O_2 obtém-se a vazão mássica de ar estequiométrica e o excesso de ar para as condições de operação da câmara de combustão ciclônica, dadas por:

$$\dot{m}_{ar,estequiométrica} = 0,286966 \quad \left(\frac{kg}{s}\right) \quad (4.7)$$

$$\lambda = \frac{\dot{m}_{ar}}{\dot{m}_{ar,estequiométrica}} = 4,91 \quad (4.8)$$

A composição teórica dos gases produtos da combustão podem ser então calculados a partir da equação da reação de combustão e o valor do excesso de ar. A relação ar-combustível (AFR) é calculada com a Eq. (4.9):

$$AFR = \left(Y_{C,daf} \frac{M_{O_2}}{M_C} + \frac{Y_{H,daf} M_{O_2}}{4 M_H} + Y_{N,daf} \frac{M_{O_2}}{M_N} + Y_{S,daf} \frac{M_{O_2}}{M_C} - Y_{O,daf} \right) (1 - Y_{H_2O,waf}) \lambda \quad (4.9)$$

A relação ar-combustível pode ser calculada para diferentes condições do combustível, isto é, em base seca e livre de cinzas (*daf*), em base seca (*db*) e como recebida (*ar*) (DA SILVA, 2013). A energia térmica liberada na combustão da biomassa é calculada pela Eq. (4.10). O calor sensível do ar de combustão pré-aquecido que entra no combustor é determinado pela Eq. (4.11) usando uma temperatura de referência de 30 ° C.

$$\dot{Q}_{biomassa} = \dot{m}_{biomassa} [PCI + c_{p,biomassa} (T_{biomassa} - T_{ref})] \quad (4.10)$$

$$\dot{Q}_{ar} = \sum \dot{m}_{i,ar} c_{p,ar} (T_{i,ar} - T_{ref}) \quad (4.11)$$

Assumindo condições ideais, tal como a combustão completa sob condições adiabáticas (sem perdas ou ganhos de calor), a temperatura de chama adiabática pode ser calculada. O cálculo deste parâmetro está baseado na primeira lei da termodinâmica e toma em conta o fato de que o calor de combustão é usado completamente para o aquecimento do combustível, o ar de combustão e os produtos da combustão (DA SILVA, 2013). Para o caso da utilização de biomassas, a temperatura de chama adiabática pode ser determinada pela Eq. (4.12):

$$T_{adiaabatica} = T_{ref} + \frac{\dot{Q}_{biomassa} + \dot{Q}_{ar}}{\dot{m}_{produtos} c_{p,produtos} + \dot{m}_a c_{p,a}} \quad (4.12)$$

A composição dos produtos da combustão é calculada assumindo uma combustão completa, e desprezando as reações de CO₂ e os mecanismos de formação/redução (DA SILVA, 2013). Portanto, as principais espécies químicas presentes nos produtos da combustão são CO₂, vapor de água (H₂O), N₂ e O₂. Estas espécies são calculadas pelas Eqs. (4.13 a 4.16) a partir do conhecimento da composição elementar do combustível e da composição do oxidante

$$\bar{m}_{CO_2,produtos} = Y_{C,daf} \frac{M_{CO_2}}{M_C} (1 - Y_{H_2O,waf}) \quad (4.13)$$

$$\bar{m}_{H_2O,produtos} = Y_{H,daf} \frac{M_{H_2O}}{M_H} (1 - Y_{H_2O,waf}) + Y_{H_2O,bagasse} \quad (4.14)$$

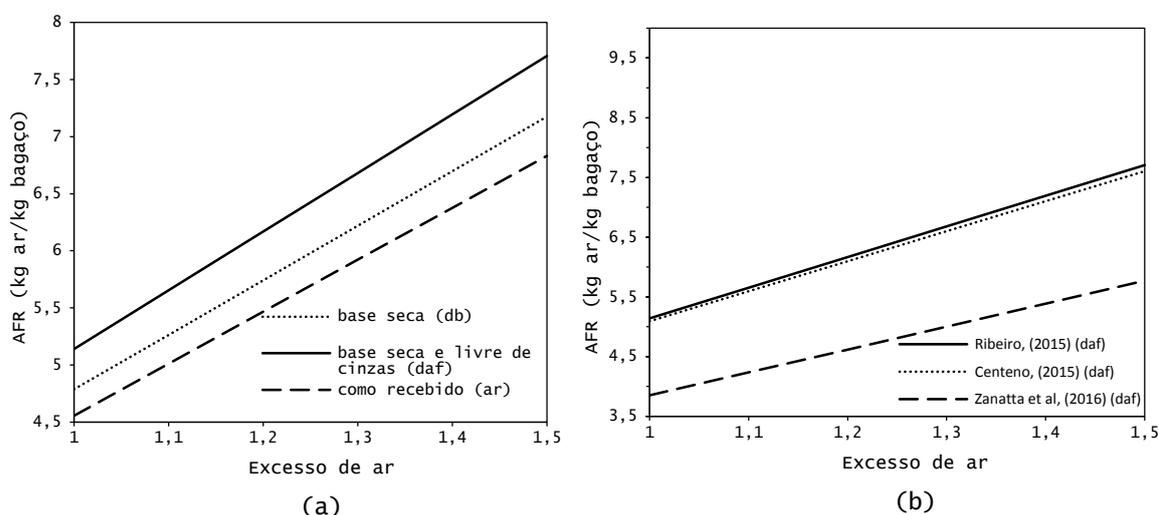
$$\bar{m}_{N_2,produtos} = Y_{N,daf} (1 - Y_{H_2O,waf}) + \bar{m}_{N_2,reagentes} \quad (4.15)$$

$$\bar{m}_{O_2,produtos} = \frac{\bar{m}_{O_2,reagentes}}{\lambda} (\lambda - 1) \quad (4.16)$$

As equações utilizadas aqui foram resumidas por conveniência, análises mais detalhadas dos processos da combustão podem ser encontrados, por exemplo, em BAZZO, 1995; CARVALHO *et al.* 2018.

A Figura 4.5 (a) mostra as curvas da relação ar-combustível para diferentes condições do bagaço, ou seja, bagaço úmido, seco e livre de cinzas ou seco, obtidas a partir da composição elementar do trabalho de Ribeiro (2017). Por sua parte, as curvas da Figura 4.5 (b) fazem uma comparação da relação ar-combustível requerida para bagaços diferentes, neste caso, em condições secas e livre de cinzas dos bagaços de Ribeiro (2017), Centeno (2015) e Zanatta *et al.* (2016).

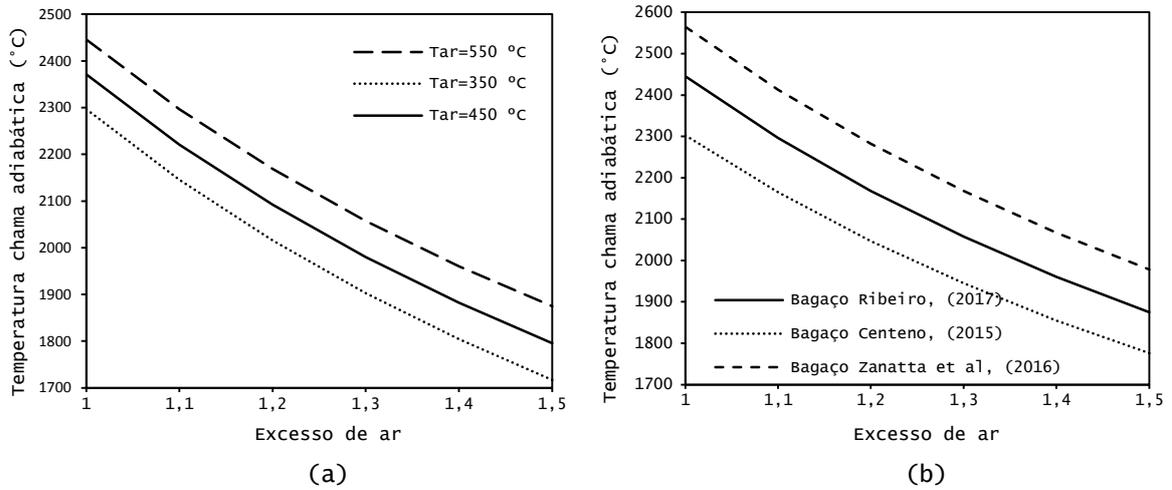
Figura 4.5- Relação ar-combustível (AFR) para o bagaço de cana-de-açúcar, (a) AFR para diferentes condições do bagaço e (b) AFR para diferentes bagaços estudados.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Por outro lado, cálculos da temperatura de chama adiabática para o bagaço de cana-de-açúcar são mostrados na Figura 4.6. A Figura 4.6 (a) mostra a tendência da temperatura de chama adiabática em função da temperatura do ar de entrada na câmara de combustão. É possível observar que a temperatura de chama adiabática aumenta quando a temperatura do ar na entrada é aumentada, e acontece o contrário quando o excesso de ar aumenta, e isso se deve à presença de uma maior quantidade de gases inertes (N_2) que absorverão calor da reação (CARVALHO *et al.* 2018). Considerando que os valores de temperatura do ar de combustão assumidos são elevados porque saem da turbina, sendo $550\text{ }^\circ\text{C}$ o valor a ser utilizado como condição de contorno nas simulações.

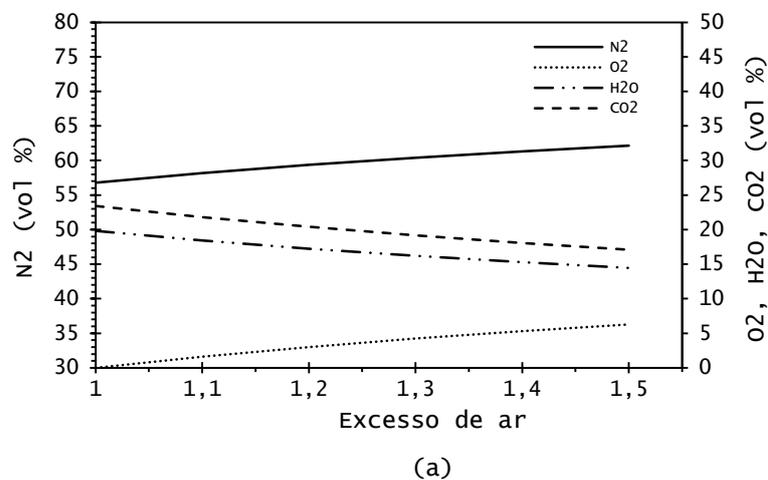
Figura 4.6- Variação da temperatura de chama adiabática para o bagaço de cana-de-açúcar, (a) para diferentes temperaturas do ar de combustão e (b) para diferentes bagaços estudados e temperatura do ar de combustão igual a 550 °C.

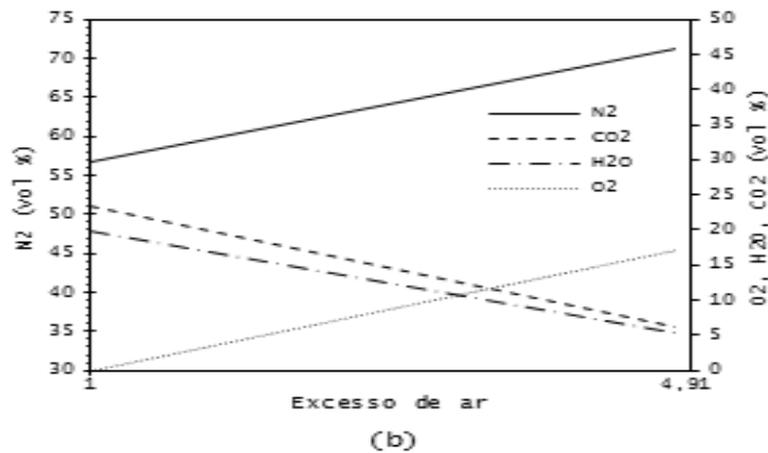


Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A Figura 4.6 (b) mostra os valores da temperatura de chama adiabática para os diferentes bagaços estudados, assumindo um valor de 550 °C para a temperatura do ar de combustão. Com relação à composição teórica dos produtos da combustão, na Figura 6 (a) e 6 (b) mostra-se a concentração volumétrica das espécies gasosas, assumindo uma combustão completa para condições teóricas e para a condição de operação da câmara ciclônica, respectivamente. Pode-se observar que o nitrogênio N_2 e o oxigênio O_2 variam na mesma proporção constante à medida que se aumenta a quantidade de ar de combustão. Em contrapartida, o dióxido de carbono CO_2 e o vapor de água H_2O diminuem quando se aumenta o excesso de ar.

Figura 4.7- Composição dos produtos da combustão do bagaço de cana-de-açúcar, (a) composição teórica e (b) composição para as condições de operação da câmara.





Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Com a Figura 4.7 verifica-se que a câmara de combustão ciclônica trabalha em condições de mistura pobre, ou seja, a quantidade de ar de combustão é muito maior em proporção ao combustível.

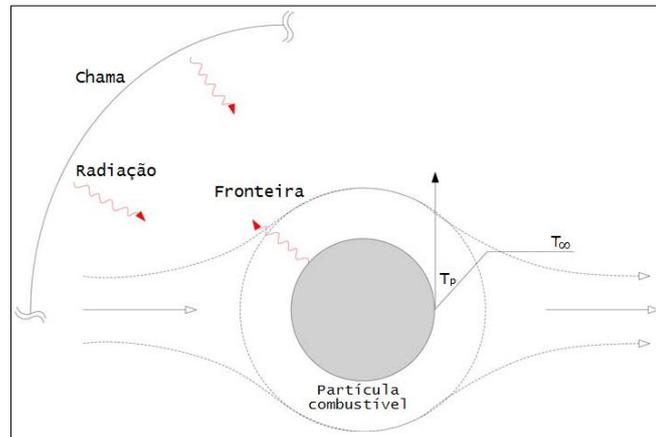
Por outro lado, na combustão de biomassa, pela quantidade de umidade e material volátil que as partículas combustíveis possuem, os sub-processos de secagem e devolatilização resultam ser importantes, porque a ignição pode ser atrasada no caso em que estes dois componentes demorem a sair da partícula, portanto devem ser analisados. Se o teor de material volátil nas partículas do combustível for elevado, a rápida liberação dos voláteis provê de gases combustíveis para auto sustentar a chama. Portanto, se realiza um cálculo aproximado do tempo de secagem e tempo de devolatilização das partículas em função da temperatura para ter uma referência aproximada deste parâmetro.

As partículas combustíveis podem ser aquecidas e experimentar secagem durante o processo da moagem (pulverização) usando os gases de saída do ciclo ou ar quente extraído do processo. Segundo Chen *et al.* (2012), para garantir capacidade de secagem de partículas de carvão, por exemplo, os gases de escape ou ar quente devem ter uma temperatura acima dos 250 °C, e manter uma temperatura entre 60–90°C na saída da moagem. O conteúdo de umidade remanescente na partícula combustível será evaporada no combustor antes da devolatilização.

Usando um modelo de transferência de calor simplificado, explicado no trabalho de Chen *et al.* (2012), o processo de secagem e aquecimento de uma única partícula combustível pode ser analisado durante a moagem e a combustão, estimando o tempo de evaporação da umidade e a taxa de aquecimento. A Figura 4.8 mostra uma ilustração da transferência de

calor entre uma única partícula combustível e os gases circundantes, e se inclui a chama luminosa no caso do processo de secagem durante a combustão, considerando-se como um modelo quase em equilíbrio.

Figura 4.8- Diagrama esquemático da transferência de calor para uma partícula combustível sólida em combustão.



Fonte: Adaptado de Chen *et al.* (2012).

Desta forma, a conservação da energia de uma partícula combustível pode ser expressa como o balance da energia interna e a transferência de calor por convecção/radiação:

$$\frac{4}{3}\pi r_p^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi r_p^2 h(T_\infty - T_p) + 4\pi r_p^2 \sigma(\varepsilon_f T_f^4 - \varepsilon_p T_p^4) \quad (4.17)$$

Onde T_∞ é a temperatura do gás quente que circunda a partícula, e T_f é a temperatura da chama. A taxa de aquecimento é fortemente dependente das temperaturas do gás e da chama, e a evaporação da água de uma partícula combustível é um processo que acopla transferência de massa e calor (CHEN, 2013). Usando o modelo de quase-equilíbrio na evaporação de uma gota, proposta inicialmente por Turns (2000), o tempo de evaporação para diferentes tamanhos de partícula é calculado seguindo as seguintes suposições:

- 1 As partículas combustíveis são consideradas esféricas com raio fixo durante a vaporização, e unicamente a massa específica diminui até alcançar a massa específica da partícula seca.
- 2 A velocidade relativa entre a partícula combustível e o gás circundante é a velocidade terminal, u_t , dado por:

$$u_t = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_g)g}{18\mu_g}, \quad \text{quando } Re_e < 2 \quad (4.18)$$

- 3 A taxa de evaporação é controlada por transferência de calor em vez de transferência de massa durante a moagem e na combustão (TURNS, 2000).
- 4 São consideradas a contribuição da transferência de calor convectiva e radiativa. Investigações de Cen *et al.* (1997) encontraram que para pequenas partículas, em combustão de carvão pulverizada, a transferência de calor convectiva é mais dominante que a transferência de calor radiativa durante os processos de aquecimento e evaporação.

Usando as suposições mencionadas, a taxa de evaporação \dot{m} em (kg/s), pode ser calculada da Eq. (4.19):

$$\frac{\dot{m}}{4\pi r_p^2} = \frac{k_g Nu}{2c_{pg}r_p} \ln(1 + B_q) \quad (4.19)$$

Onde, B_q , é o número de transferência de massa e, Nu , é o número de Nusselt podendo ser calculados a partir da Eqs. (4.20) e (4.21). Logo, o tempo de evaporação (τ_{boil}) é obtido integrando a Eq. (4.22).

$$Nu = 2,0 + 0,6Re_d^{1/2}Pr^{1/3} \quad (4.20)$$

$$B_q = \frac{c_{pg}(T_\infty - T_{boil})}{h_{fg} - \frac{4\pi r_p^2 \sigma (\varepsilon_f T_f^4 - \varepsilon_p T_{boil}^4)}{\dot{m}}} \quad (4.21)$$

$$\tau_{boil} = \frac{2c_{pg}r_p^2(\rho_0 - \rho_{dry})}{3k_g Nu \cdot \ln(1 + B_q)} \quad (4.22)$$

Chen *et al.* (2012) realizaram este estudo da secagem utilizando partículas de carvão com as equações anteriores para determinar o tempo de vaporização da água das partículas durante o processo de moagem e durante a combustão. Os dados utilizados por eles são resumidas na Tabela 4.6 e os resultados são mostrados na Figura 4.9 (a) e 4.9 (b).

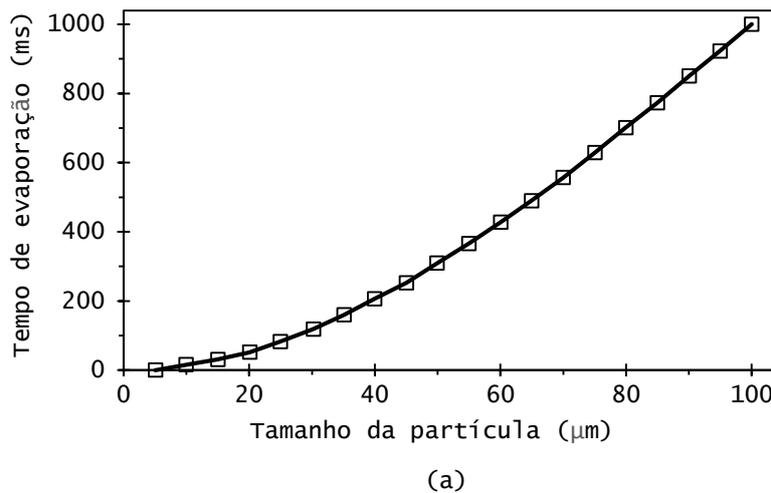
Tabela 4.6- Parâmetros usados na estimação do tempo de secagem e aquecimento de partículas de carvão.

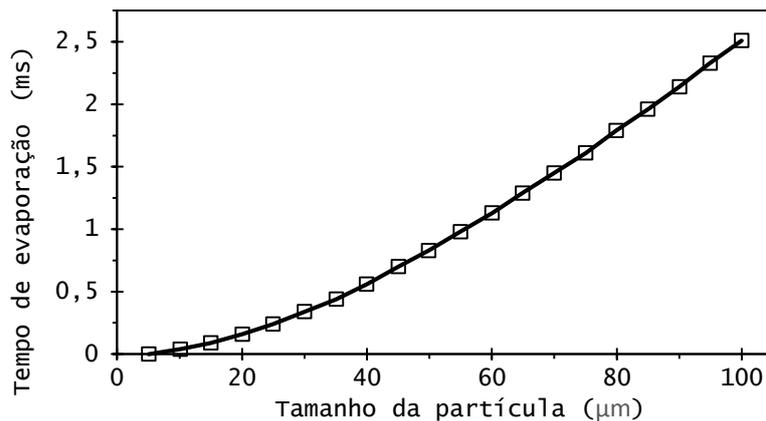
Condição de secagem	Temperatura °C			Propriedades do gás	Propriedades do combustível
	T_{∞}	T_f	T_{boil}		
Secagem na moagem	105	-	100	$c_{p,g}, \mu, \rho, k_{\infty}, k_{H_2O}$ para o ar e o vapor de água são obtidos de Turns, (2012), para $\bar{T}_g = \frac{1}{2}(T_{\infty} + T_{boil})$	$\varepsilon = 0,8$ $c_p = 1500 J/kg \cdot K$ $h_{fg} = 2442 kJ/kg$
Secagem no combustor	1000	1800	100	$c_{p,g} = c_{p,H_2O}$ $k_g = 0,6k_{\infty} + 0,4k_{H_2O}$	Conteúdo de umidade = 10%

Fonte: Adaptado de Chen *et al.* (2012).

Os cálculos de Chen *et al.* (2012) mostram que partículas de carvão de 100 μm de diâmetro demorariam 1 segundo para perder toda a umidade contida nelas durante o processo de moagem considerando as temperaturas de ar de 105 °C, e demorariam 2,5 milissegundos quando expostas às temperaturas de chama (1800 °C) dentro do combustor. Embora a análise da secagem realizada é baseada em partículas combustíveis isoladas, o processo de secagem em grupo pode mostrar outro comportamento e dependências, portanto deve considerar-se estudar mais profundamente.

Figura 4.9- Tempo de secagem das partículas de carvão dos estudos de Chen *et al.* (2012). (a) secagem durante a moagem e (b) secagem no combustor.



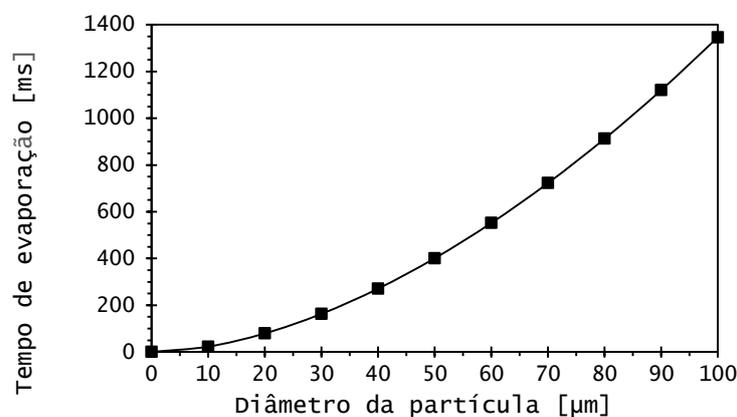


(b)

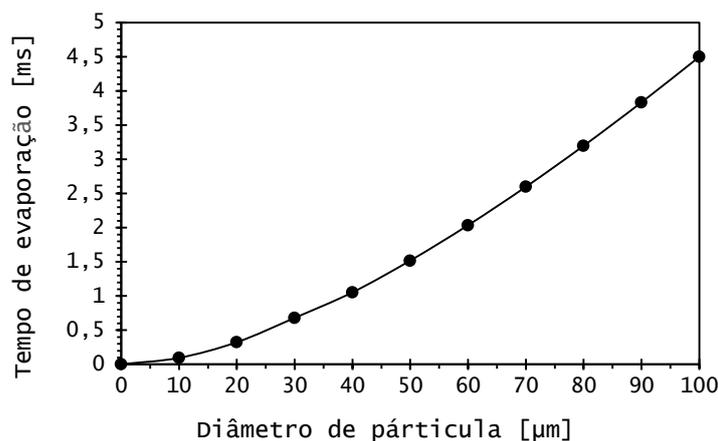
Fonte: Adaptado de Chen *et al.* (2012).

Seguindo a mesma metodologia de Chen *et al.* (2012), realizou-se a previsão do tempo de secagem para as partículas de bagaço de cana-de-açúcar para duas condições diferentes relacionadas com a quantidade de umidade presente nas partículas. O primeiro cálculo foi realizado assumindo que as partículas possuam 50% de umidade e a segunda estimativa foi realizada usando o conteúdo de umidade de 4,8% que é a porcentagem de umidade informada na Tabela 4.1 para o bagaço de Ribeiro (2017) e a mesma que será configurada como entrada nas simulações da câmara de combustão ciclônica. Além disso, a segunda estimativa realizou-se usando uma temperatura do ar de transporte de 250 °C, que é uma condição de operação da câmara ciclônica. A Figura 4.10 (a) e 4.10 (b) mostra as curvas que descrevem o tempo de evaporação das partículas de bagaço de cana durante a moagem e secagem dentro do combustor, respectivamente, assumindo conteúdo de 50% de umidade.

Figura 4.10- Tempo de secagem das partículas de bagaço de cana-de-açúcar assumindo 50% de umidade, durante (a) moagem e (b) combustão.



(a)



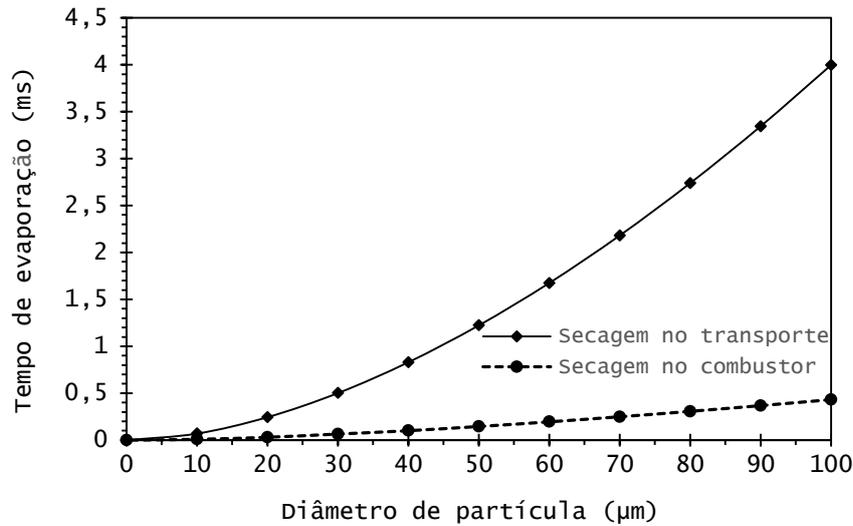
(b)

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

As estimativas de tempo de secagem mostradas nas Figuras 4.10 indicam que uma partícula de bagaço de cana que contém 50% de umidade demoraria aproximadamente 1,35 segundos para secar-se quando estiver exposta ao ar com temperatura de 105 °C durante a moagem, e demoraria aproximadamente 4,5 milissegundos quando esta partícula se encontre nas proximidades da chama dentro do combustor.

A outra estimativa realizada do tempo de secagem é visualizada na Figura 4.11. Assim, estima-se que o tempo de secagem de uma partícula de bagaço de cana de 63 µm (tamanho de partícula utilizada nas simulações) nas condições de operação da câmara ciclônica seria de aproximadamente 1,9 milissegundos. Porém, se durante o transporte das partículas a água contida não for evaporada, dentro do combustor a partícula demoraria menos de 0,3 milissegundos para evaporar essa água.

Figura 4.11- Tempo de secagem das partículas de bagaço de cana-de-açúcar durante o transporte e dentro o combustor, nas condições de operação da câmara ciclônica.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Os valores de tempo de evaporação calculados na Figura 4.11 podem ser comparados posteriormente com valores obtidos nas simulações da câmara em ANSYS FLUENT, por exemplo, se conseguir medir o tempo que as partículas demoram no tubo de alimentação de biomassa e se a umidade for evaporada totalmente nesse tempo de residência dentro do tubo de alimentação.

Com relação à estimativa do tempo necessário para a vaporização do material volátil contido em uma partícula de bagaço de cana-de-açúcar, como uma aproximação utiliza-se o modelo de devolatilização de taxa cinética única, considerando que o modelo escolhido para a devolatilização nas simulações é o modelo de duas reações concorrentes e não o modelo de taxa cinética única, mas como uma aproximação pode ser útil realizar esses cálculos. Assim, partindo da equação usada para a taxa de perda de massa durante a devolatilização, Eq. (4.23) (FLUENT, 2017):

$$-\frac{dm_p}{dt} = k(m_p - (1 - f_{v,0})m_{p,0}) \quad (4.23)$$

Onde $f_{v,0}$ é fração inicial de material volátil, $m_{p,0}$ é a massa inicial da partícula e k é a taxa cinética dada pela equação de Arrhenius. A equação pode ser resolvida seguindo o procedimento realizado por Giddings (2000), da seguinte forma:

$$\int_{m_{p,0}}^{(1-f_v)m_{p,0}} \frac{dm_p}{m_p - (1 - f_{v,0})m_{p,0}} = - \int_0^t k dt \quad (4.24)$$

$$\left[\ln(m_p - (1 - f_{v,0})m_{p,0}) \right]_{m_{p,0}}^{(1-f_v)m_{p,0}} = -kt \quad (4.25)$$

$$\ln[(1 - f_v)m_{p,0} - (1 - f_{v,0})m_{p,0}] - [\ln(m_{p,0} - (1 - f_{v,0})m_{p,0})] = -kt \quad (4.26)$$

$$\ln(f_{v,0} - f_v)m_{p,0} - \ln(f_{v,0}m_{p,0}) = -kt \quad (4.27)$$

$$\ln \frac{f_{v,0} - f_v}{f_{v,0}} = -kt \quad (4.28)$$

$$\ln(1 - x) = -kt \quad (4.29)$$

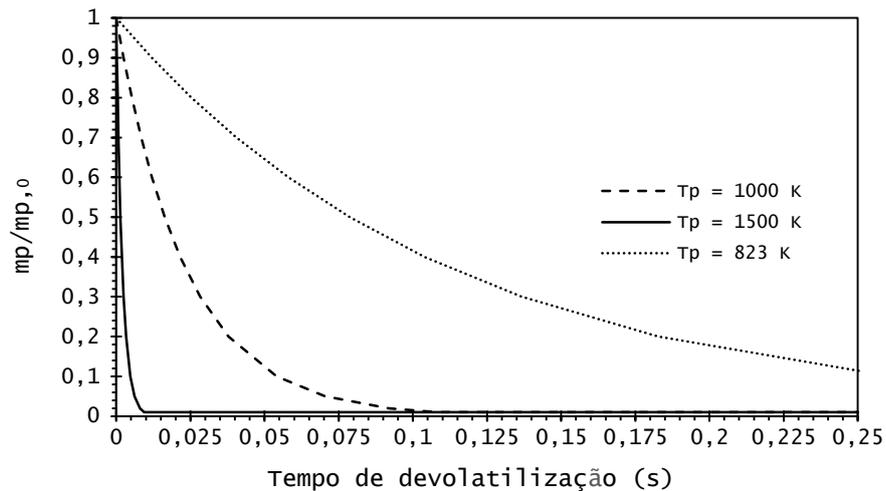
Na Eq. (4.29) x é a porcentagem de decomposição do material volátil e t é o tempo para alcançar a decomposição dessa porcentagem de material volátil. Usando os dados cinéticos da Tabela 4.2 para o bagaço de cana e assumindo 95% de conversão da matéria volátil à uma temperatura de 823 K, que é a temperatura do ar de combustão quando as partículas começam a ser arrastadas, tem-se um tempo de devolatilização igual a:

$$\ln(0.05) = -8.8099t \quad (4.30)$$

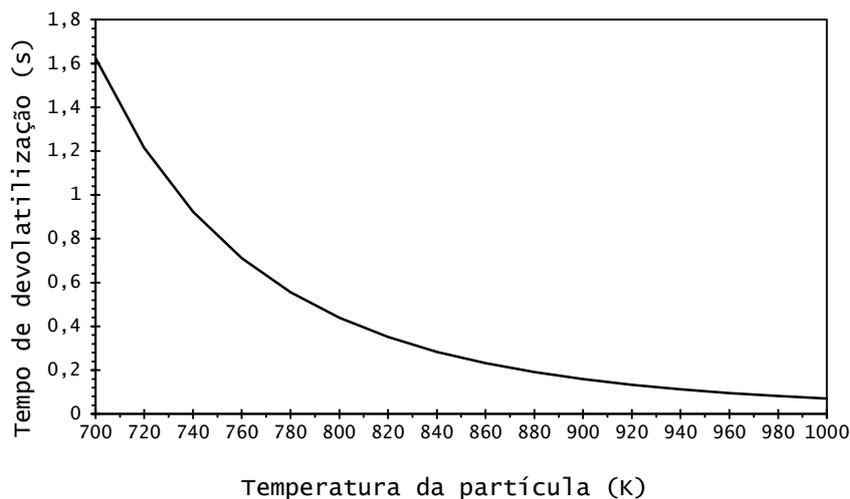
$$t = 0,34 \text{ (s)} \quad (4.31)$$

A Figura 4.12 mostra a curva que descreve o tempo que demora a liberação dos voláteis na partícula dependendo da temperatura que a partícula alcança.

Figura 4.12- Estimativas do tempo de devolatilização das partículas de bagaço de cana, (a) para três temperaturas de interesse e (b) para baixas temperaturas.



(a)



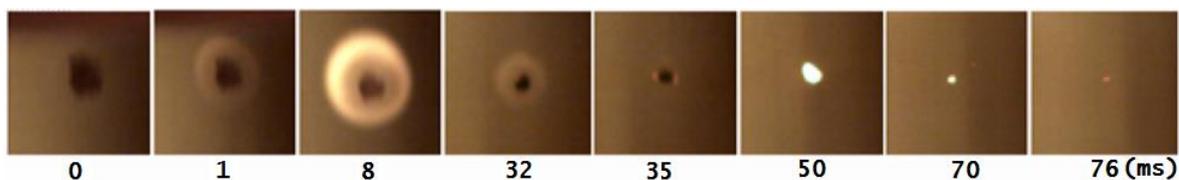
(b)

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A Figura 4.12 mostra que o tempo de devolatilização das partículas de bagaço será pequeno (podendo alcançar milésimas de segundo) quando as partículas começarem a ser transportadas pelo ar de combustão na saída do tubo de biomassa, e podem alcançar a devolatilização completa em regiões próximas das zona de recirculação, onde as temperaturas elevam-se devido ao transporte de vórtices de temperatura desde as regiões próximas da chama.

Sobre o tempo de queima de partículas de bagaço de cana-de-açúcar em testes experimentais, Khatami *et al.* (2012) estudaram o comportamento da combustão de partículas pulverizadas de quatro tipos de carvão e do bagaço de cana-de-açúcar brasileiro em atmosferas de O_2/N_2 e O_2/CO_2 . As partículas com tamanho de 75-90 μm foram injetadas sob escoamento laminar em uma bancada de escala com forno tipo tubo transparente (DTF) aquecido eletricamente a 1400 K, onde, após experimentar altas taxas de aquecimento, acenderam e queimaram. A Figura 4.13 mostra fotografias de alta resolução e velocidade tomadas do processo de combustão do bagaço com ar atmosférico. Os números exibidos em cada quadro indicam o tempo em milissegundos, sendo que o zero não marca o início da combustão, apenas representa o início de cada sequência representada.

Figura 4.13 - Fotografias dos eventos típicos no processo de combustão de uma partícula de bagaço de cana-de-açúcar com ar.



Fonte: Adaptado de Khatami *et al.* (2012).

As fotografias mostram que em atmosferas de O_2/N_2 os voláteis evoluíram e queimaram em chamas esféricas que envolviam cada partícula. Como as chamas eram transparentes, pode-se apreciar que as partículas celulósicas podiam diminuir durante a queima da matéria volátil à medida que perdiam massa. Após a extinção da chama volátil, iniciou-se a queima luminosa do carvão e na qual observa-se um encolhimento do núcleo (KHATAMI *et al.* 2012).

Dessa forma, neste capítulo revisou aspectos relacionados à combustão do bagaço de cana-de-açúcar, buscou-se na literatura dados de cinética química e propriedades físicas desse combustível para serem configuradas nas simulações da câmara de combustão. Na parte final deste capítulo, realizou-se cálculos de parâmetros básicos da combustão, que podem ajudar a entender inicialmente o comportamento da combustão do bagaço. Assim, no próximo capítulo definem-se a malha computacional e as condições de contorno para as simulações.

Capítulo 5

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA CÂMARA DE COMBUSTÃO CICLÔNICA

Uma simulação em Dinâmica de Fluidos Computacional é composta por três estágios: o pré-processamento, o processamento e o pós-processamento. As seções deste capítulo apresentam aspectos relacionados com o pré-processamento, que envolve a preparação da geometria, a geração da malha computacional, estudo de independência de malha e as condições de contorno correspondentes. Algumas estratégias de solução também são propostas para as simulações.

5.1 Malha computacional da câmara de combustão

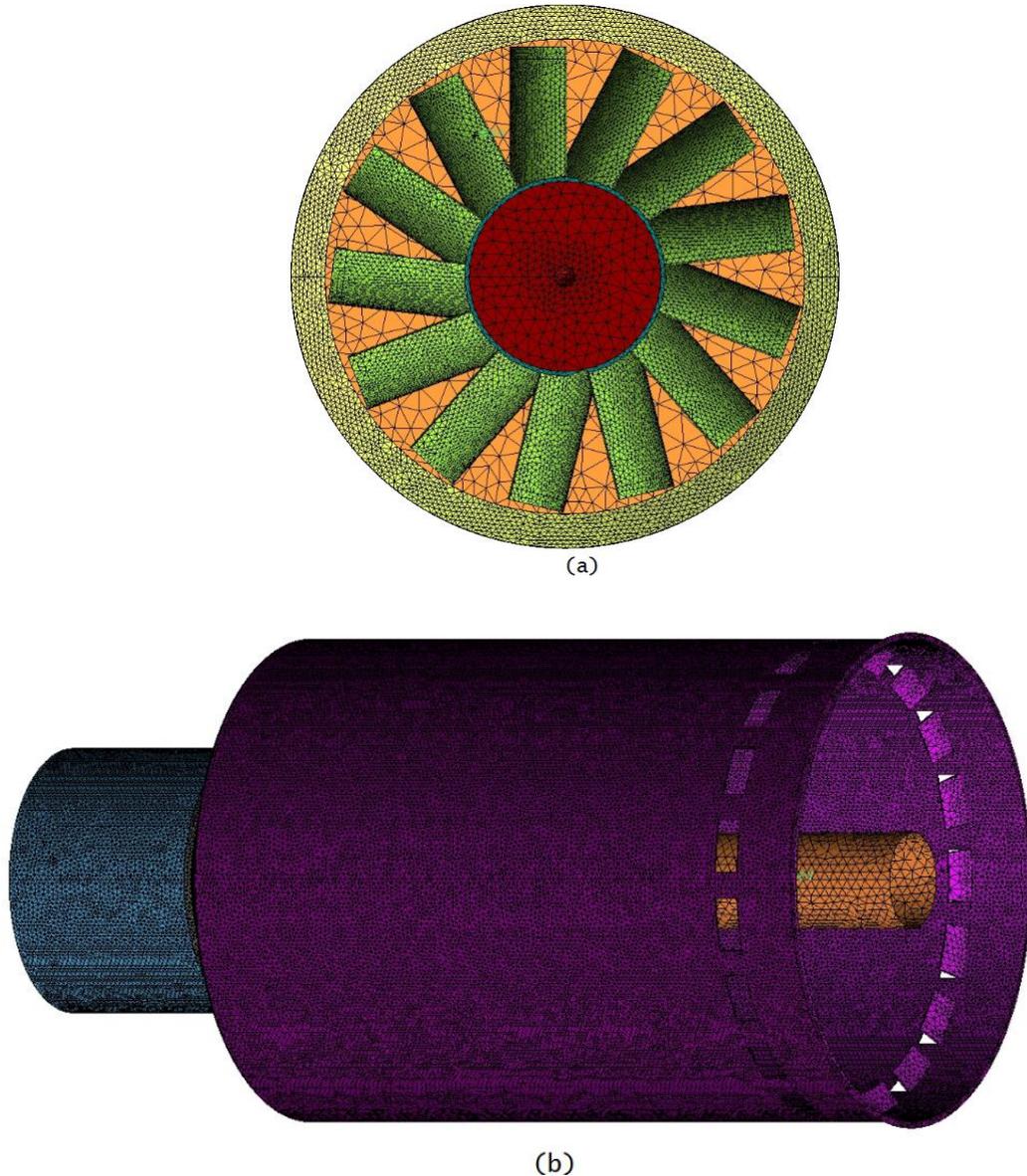
A geometria e a malha computacional da câmara de combustão ciclônica foram realizadas no software ICEM CFD 17.0 do pacote comercial ANSYS. Para a malha computacional, a geometria da câmara foi dividida em 5 partes com o intuito de realizar um refinamento em partes mais complexas como na região do *swirler* e as regiões dos orifícios de entrada do ar de resfriamento. A malha é realizada separadamente em cada uma das partes, e posteriormente acopladas por superfícies configuradas como interfaces em ANSYS FLUENT.

As malhas computacionais são do tipo híbridas não-estruturadas e estão compostas por elementos do tipo tetraedros nas superfícies curvas de cada uma das partes, e hexaedros nas regiões interiores. As Figuras 5.1(a) e 5.1(b) mostram a discretização espacial nas superfícies das palhetas do *swirler* e do combustor, respectivamente.

Detalhes do interior das malhas computacionais das diferentes partes do domínio da câmara são mostradas nas Figuras 5.2(a) e 5.2(b). Nestas figuras pode-se observar a transição

uniforme entre os tetraedros e pirâmides até o núcleo hexaédrico sem ter mudanças abruptas no seu crescimento.

Figura 5.1- Malhas nas superfícies do (a) *swirler* e (b) combustor.

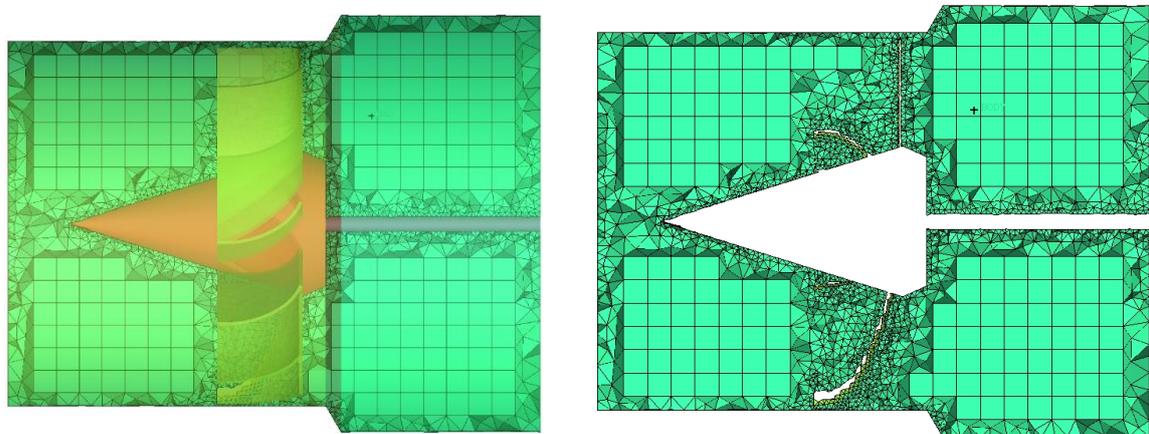


Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

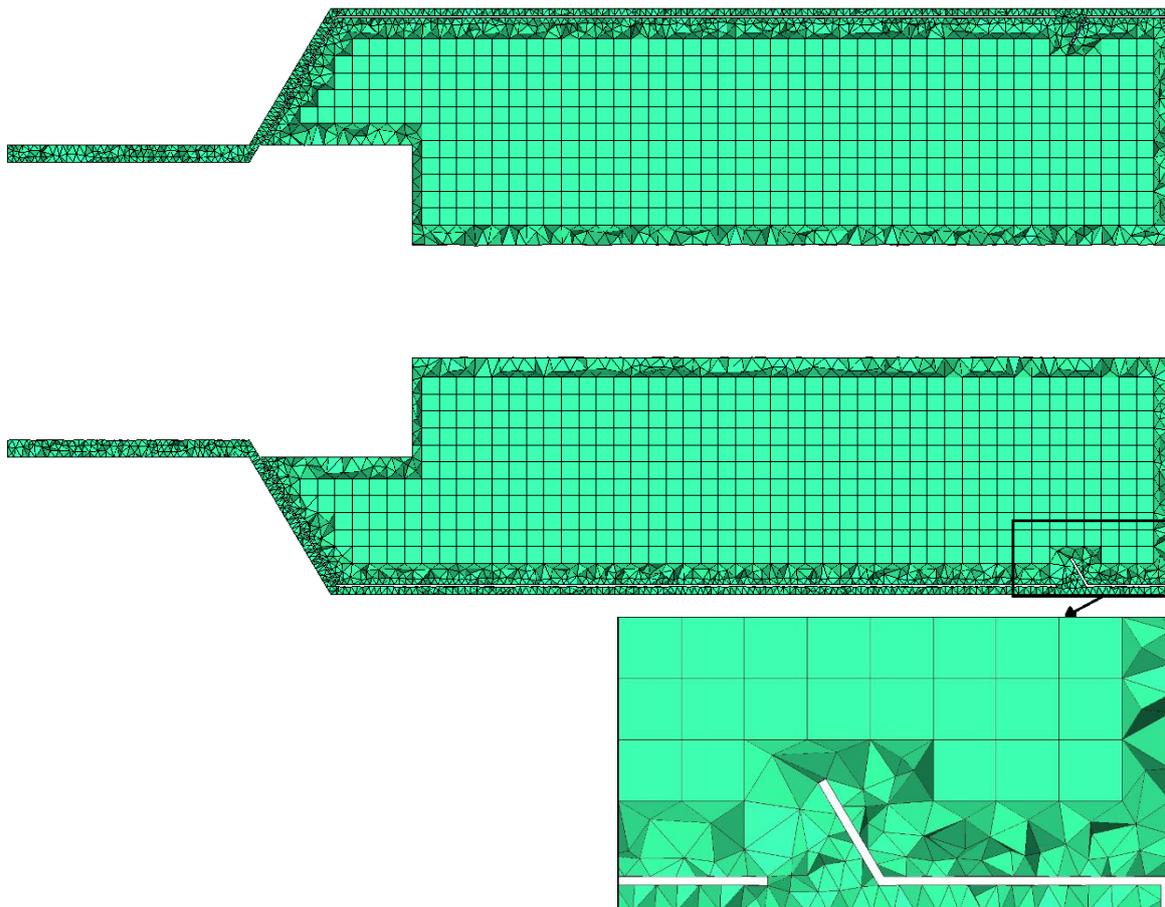
Por conta de que os resultados precisam ser independentes do número de elementos da malha computacional, foi realizado o estudo da independência de malha. A verificação da convergência espacial em uma simulação computacional é um método direto para determinar o erro de discretização em uma simulação de CFD. O método envolve a execução da simulação em duas ou mais malhas sucessivamente mais finas. Quando uma malha é refinada, as células da malha tornam-se menores e o número de células no domínio do escoamento aumentam, com isso o passo de tempo também precisa ser reduzido, e portanto

os erros de discretização espacial e temporal devem se aproximar assintoticamente de zero, excluindo o erro de arredondamento do computador (ANSYS FLUENT, 2017).

Figura 5.2- Interior das malhas computacionais (a) *swirler* e (b) combustor com detalhe do refinamento na região dos orifícios de resfriamento.



(a)



(b)

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Segundo o site de LEAP CFD TEAM (2019) sugere-se que o estudo de independência de malha comece com a convergência da modelagem de uma primeira malha, seguida por uma segunda malha cujo número de elementos é incrementado em 1,5 vezes. Logo, se os valores de interesse são semelhantes ou atingem o critério estabelecido, a independência será obtida com sucesso, se não fosse o caso uma terceira malha é testada. Seguindo este critério, foram simuladas três malhas computacionais para a independência de malha, na Tabela 5.1 são informados o número de elementos e nós de cada malha.

Tabela 5.1- Informações das malhas no estudo de independência de malha

Malha	Número de elementos	Número de nós	Tamanho médio dos elementos (mm)	Qualidade ortogonal	Max. relação de aspecto
Malha 1	3.733.390	1.057.876	8	0,129	26,77
Malha 2	3.165.009	723.267	11	0,151	23,68
Malha 3	3.055.527	633.919	14	0,189	21,74

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Embora no estudo de independência de malha seja recomendado usar malhas com um número de elementos de 1,5 vezes a mais de uma malha para outra, os elementos refinados nas partes mais curvas e que precisam de refinamento são quase constantes em tamanho de elemento para cada malha, sendo difícil diminuir ou aumentar sem comprometer a qualidade da malha, o que tornou difícil conseguir malhas com número de elementos igual a 1,5 vezes de uma para outra. Basicamente, as malhas computacionais têm diferença unicamente nos elementos hexaédricos (nas regiões interiores) com tamanho de 8, 11 e 14 mm para a malha mais refinada e a menos refinada, respectivamente.

5.2 Condições de contorno para as simulações

Nesta seção o tipo de condição de fronteira aplicado a cada um dos limites físicos do domínio da câmara de combustão é explicado. A aplicação das condições de contorno de um determinado problema físico é uma parte muito importante na simulação numérica. Em problemas reais elas são difíceis de serem medidas e controladas, e só o conhecimento detalhado da física do problema permitirá escolher a correta condição de contorno (RODRIGUES, 2009).

5.2.1 Entradas

As condições de fronteira nas entradas do domínio da câmara de combustão foram especificadas como entradas de vazão mássica proporcionais à área de cada uma das entradas e com direção normal à entrada, uma vez que a composição do gás e a temperatura em cada entrada são conhecidas. As vazões mássicas do ar e do combustível são informadas na Tabela 2.1 (pág. 54). A intensidade turbulenta e diâmetro hidráulico foram calculados utilizando as relações das Eqs. 5.1 e 5.2 dadas na Guia Teórica de ANSYS FLUENT 17.0.

$$I \equiv \frac{u'}{u_{\text{avg}}} \cong 0,16(Re_{DH})^{-1/8} \quad (5.1)$$

$$Re_{DH} = \frac{\rho u D_H}{\mu} \quad (5.2)$$

Onde, Re_{DH} é o número de Reynolds calculado, utilizando o diâmetro hidráulico da área da entrada. ANSYS FLUENT recomenda que a intensidade turbulenta esteja na faixa de 1 a 10%. Os valores de intensidade turbulenta calculadas para as duas entradas e uma saída da câmara ciclônica são informadas na Tabela 5.2.

5.2.2 Saída

A saída da câmara de combustão ou exaustão foi configurada como uma condição *pressure-outlet* assumindo uma distribuição de pressão em equilíbrio radial, de modo que a pressão na saída satisfaça a Eq. (5.3):

$$p(r = 0) = p_0 \quad (5.3)$$

Onde r é a distância radial a partir da linha central e p_0 é a pressão na linha central assumida para ser a pressão atmosférica (101,3 kPa).

5.2.3 Paredes

Todas as paredes do combustor foram configuradas para serem de aço, e condições de não-escorregamento foram configuradas para todas elas. Para o material isolante pode ser utilizado duas camadas de tijolo refratário, sendo que a camada interna deve ser de alta temperatura com espessura aproximada de 63,5 mm (medida comercial de 2,5 polegadas), com condutividade térmica de aproximadamente 1,67 W/mK (GIDDINGS, 2000). A segunda camada em contato com a parede de aço pode ser tijolo refratário de 63,5 mm de espessura com condutividade térmica de aproximadamente 0,350 W/mK. O revestimento de

ção tem 1,587 mm de espessura com condutividade térmica de aproximadamente 43 W/mK. Assim, o fluxo de calor da câmara para o meio ambiente pode ser calculado como:

$$\dot{q} = -kA \left(\frac{dT}{dx} \right) = -\frac{\Delta T}{\sum \frac{\Delta x}{k}} \quad (Wm^{-2}) \quad (5.4)$$

A emissividade ε_w para as paredes de combustores, queimadores, entre outros, normalmente pode ser assumido para estar na faixa de 0,6-0,8. A emissão e a reflexão dessas superfícies são comumente assumidas para serem difusas, o que é uma aproximação razoável considerando as paredes ásperas de caldeiras, por exemplo. Para as partes com menor temperatura do combustor como as paredes do *quarl*, entradas de ar, e similares, os valores típicos para a ε são de 0,2-0,3 e também são tratados como difusos (TOPOROV, 2014). A Tabela 5.2 fornece dados das condições de contorno configuradas em ANSYS FLUENT.

Tabela 5.2- Condições de contorno configuradas para a câmara de combustão ciclônica.

Fronteira	Vazão mássica (kg/s)	Temperatura (K)	Fração mássica de O ₂	Intensidade turbulenta (%)
Entrada ar combustão	1,175	823	0,23	3,45
Entrada ar e combustível	0,235	523	0,23	3,54
Entrada combustível	0,0597	323	-	3,54
Exaustão	-	1283	-	3,62

Fronteira	Temperatura (K)	Emissividade ε	Condição para o modelo DPM
Paredes zona da entrada do ar	823	0,6	Reflexão
Paredes zona do swirler	823	0,6	Reflexão
Paredes zona de reação	1283	0,7	Reflexão
Paredes do revestimento	1283	0,7	Reflexão
Paredes do tubo de biomassa	523	0,2	Reflexão

Fonte: Elaborado pelo próprio autor

5.2.4 Condições de contorno para as partículas

Em ANSYS FLUENT, *coal calculator* é uma ferramenta para converter informação da composição do combustível como a análise imediata, análise elementar e poder calorífico, em entradas de simulação como os coeficientes estequiométricos do material volátil, reações de combustão, entalpias no estado padrão das espécies voláteis, frações de material volátil e *char* do combustível, entre outros. Segundo ANSYS FLUENT, esta conversão é rápida e precisa, portanto evita erros a partir de cálculos manuais. Nas simulações foi utilizada esta

ferramenta a partir da análise imediata e elementar do bagaço de cana-de-açúcar de Ribeiro (2017).

A dispersão das partículas no meio contínuo devido à turbulência pode ser prevista por dois modelos disponíveis em ANSYS FLUENT, o modelo de rastreamento estocástico (*stochastic tracking*) e o modelo de nuvem de partículas (*particles cloud*). O modelo de rastreamento estocástico inclui os efeitos das flutuações instantâneas da velocidade turbulenta na trajetória das partículas. Em contrapartida, o modelo de nuvem de partículas descreve a evolução estatística de uma nuvem de partículas sobre uma trajetória média (ANSYS FLUENT, 2017). Logo, entende-se que se consegue uma simulação mais realista da trajetória das partículas quando o resultado é menos dependente de muitas partículas seguindo um caminho específico. Portanto, foi utilizada a dispersão estocástica de partículas por meio do modelo *Discrete Random Walk*, no qual as mudanças aleatórias são feitas no componente turbulento do vetor velocidade, u' , em cada célula computacional para alterar a trajetória das partículas.

A distância percorrida por uma partícula antes do próximo cálculo de sua trajetória é denominada comprimento característico. É possível que as partículas possam cair numa região de recirculação no escoamento, o que levaria a um número de iterações infinito sem alcançar uma solução. Para prevenir este tempo de cálculo perdido, o número máximo de passos para cada partícula é fixada. O produto do número de passos pelo comprimento característico é a distância máxima percorrida pela partícula antes de seu cálculo ser finalizado. Ambos valores foram configurados a valores padrão recomendados por ANSYS FLUENT.

O fator de relaxação padrão para o modelo DPM é configurado para 0,5, isto permite obter a média entre o valor anterior e novo valor na atualização das variáveis como a massa, quantidade de movimento e da troca de calor com a fase contínua em cada iteração. A configuração padrão pode ser alterada para valores pequenos para obter soluções estáveis.

5.3 Esquemas numéricos de solução

A solução das equações de transporte que governam os escalares (temperatura, pressão, concentrações de espécies) requer esquemas de discretização (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Entre os métodos de solução de ANSYS FLUENT, esquemas de ordem elevada envolvem mais nodos próximos e reduzem os erros de discretização ao trazer uma influência mais ampla. Formulações que não consideram a direção do escoamento (escoamentos anisotrópicos) são instáveis, e portanto são necessários esquemas de ordem mais elevada que preservem a estabilidade e a sensibilidade à direção do escoamento.

Os esquemas de discretização de terceira ordem QUICK e MUSCL podem fornecer melhor precisão do que o esquema de segunda ordem, no caso dos escoamentos rotacionais que apresentam uma elevada anisotropia. O esquema QUICK é aplicável às malhas quadrilaterais ou hexaédricas, enquanto o esquema MUSCL é usado em todos os tipos de malhas. Se o esquema QUICK for usado para malhas híbridas, será usado apenas para células quadrilaterais e hexaédricas (ANSYS FLUENT, 2017). Entretanto, o esquema de terceira ordem lei de potência é mais preciso para problemas unidimensionais, uma vez que tenta representar a solução exata mais de perto e geralmente produz a mesma precisão que o esquema de primeira ordem. A discretização de segunda ordem UPWIND pode ser aplicada a todos os tipos de células (ANSYS FLUENT, 2017).

Para malhas não refinadas, as soluções obtidas com o esquema QUICK são frequentemente mais precisas do que os esquemas UPWIND (primeira ordem e segunda ordem). Logo, pelo fato do esquema QUICK levar em conta a direção do escoamento e aplicar bem os modelos quando se têm malhas não refinadas com elementos tetraédricos e hexaédricos, resulta ser adequado para escoamentos rotacionais, portanto para as simulações da câmara de combustão ciclônica escolheu-se este método de solução.

Em relação à discretização usada para a pressão, recomenda-se a utilização do esquema *body-force-weighted* para malhas com células tetraédricas e hexaédricas e quando o problema envolve grandes forças de campo. Por sua vez, o esquema PRESTO! deve ser usado para malhas puramente hexaédricas e para escoamentos com elevados números de *swirl*, convecção natural com número Rayleigh elevado, escoamentos rotativos de alta velocidade e escoamentos em domínios muito curvos (ANSYS FLUENT, 2017). Para escoamentos compressíveis recomenda-se utilizar o esquema de Segunda Ordem. Em muitos processos, o esquema Standard é aceitável com um custo computacional baixo. Como a malha da câmara de combustão em estudo é do tipo híbrido, o esquema *body-force-weighted* foi escolhido nas configurações para as simulações.

E quanto ao método de acoplamento da pressão-velocidade, ANSYS FLUENT fornece quatro tipos de algoritmos segregados e um algoritmo acoplado. Os algoritmos segregados disponíveis são: SIMPLE, SIMPLEC, PISO e *Fractional Step* (FSM) para casos cuja solução depende do tempo. Esses esquemas são referentes à escolha do algoritmo de solução *pressure-based*. Para cálculos em regime estacionário, geralmente usa-se os algoritmos SIMPLE ou SIMPLEC, enquanto o PISO é recomendado para cálculos em regime transiente e malhas com alta obliquidade (*skewness*) (FLUENT, 2017).

O algoritmo *Coupled* permite um acoplamento de pressão-velocidade total. Este solver oferece algumas vantagens sobre os algoritmos segregados. O algoritmo acoplado obtém uma implementação de fase única mais robusta e eficiente para escoamentos em regime permanente (ANSYS FLUENT, 2017). Neste estudo utiliza-se o algoritmo SIMPLE para a solução do acoplamento pressão-velocidade.

Com relação aos fatores de relaxação (UFR), inicialmente foram configurados valores de 0,3 para a pressão, 0,7 para a densidade (continuidade), 0,7 para a quantidade de movimento, 0,8 para a turbulência, 0,95 para as espécies gasosas, 0,95 para o modelo DPM e 0,95 para a equação da energia. Segundo Kangwanpongpan (2013), o UFR para a equação da quantidade de movimento pode reduzir até valores entre 0,5–0,6 para escoamentos rotacionais elevados, além disso para escoamentos de elevado *swirl* ou malhas de alta obliquidade, os fatores de relaxação para a densidade, quantidade de movimento e turbulência poderiam ser reduzidos para melhorar a convergência, por exemplo, valores de 0,6 para a densidade, 0,6 para a quantidade de movimento e 0,7 para a turbulência.

Recomenda-se também para aumentar a estabilidade da convergência que os UFR para algumas equações deve ser ajustado antes de inicializar as reações. O fator UFR para a pressão pode ser aumentado levemente até 0,5 e a quantidade de movimento pode ser reduzida a 0,2. Quando a fase discreta é ativada para iniciar as reações de combustão, são requeridas valores de UFR pequenos (aproximadamente 0,01) para assegurar a convergência numérica e para não extinguir a chama configurada como uma região de alta temperatura dentro da zona de reação, posteriormente depois de formada a chama esses valores pequenos devem ser aumentados pouco a pouco até alcançar valores próximos a 0,5.

Igualmente, devido à natureza iterativa do problema precisa-se definir um erro mínimo desejável ou critério de convergência. Geralmente, não existe um único critério que

seja reconhecido para avaliar a convergência, por esta razão frequentemente são consideradas duas situações (ANSYS FLUENT, 2017):

- **Análise dos resíduos.**

A convergência é obtida quando o resíduo de todas as variáveis é igual ao critério estabelecido pelo usuário. Geralmente, os valores oscilam entre 1×10^{-04} , suficiente para obter uma avaliação do campo do escoamento; e 1×10^{-06} requerida em problemas com geometrias complexas.

- **Análise dos balanços de massa, momentum e energia.**

Quando os resíduos não diminuem para igualar o critério de convergência estabelecido, verificam-se os valores dos balanços de massa, momentum e energia. Nesse caso, considera-se que a convergência é obtida se a diferença entre os escoamentos na entrada e na saída é menor ao 0,2%.

5.4 Procedimento de solução

Quando na simulação de um caso são configurados vários modelos, como são os casos de combustão, é recomendado seguir uma sequência de passos para obter uma solução convergida. A ideia é obter uma solução parcial convergida para cada um dos modelos configurados, e posteriormente esta solução parcial seja um ponto de partida para o seguinte passo até incluir todos os modelos e condições do problema global, e obter uma solução final convergida. Assim, ANSYS FLUENT recomenda a seguinte sequência:

Configuração do problema: São configurados todos os modelos e condições de contorno do problema.

Simulação não reativa: Inicialmente, obtém-se uma solução para o escoamento a frio, ainda sem incluir correntes de combustíveis. Para isto, são desativados os modelos de transporte de espécies, modelo de fase discreta e o modelo de radiação. Alguns autores como Giddings (2000), após a convergência do escoamento a frio, liberam o escoamento das partículas combustíveis e obtém uma solução convergida entre o escoamento contínuo e da fase particulada antes de iniciar as reações.

Simulação reativa: A partir dos resultados da simulação a frio, são iniciadas as simulações com as reações de combustão e trajetória das partículas. Para isto são ativados os modelos de transporte de espécies e o modelo de fase discreta DPM. No começo desta etapa da simulação precisa-se definir manualmente regiões com alta temperatura (entre 1500 a 2000 K na zona de reação) e concentração de gases voláteis (normalmente $X_{CO_2} = 0,1$ e $X_{H_2O} = 0,01$) dentro da zona de reação da câmara, visando iniciar a combustão. O modelo de radiação ainda se mantém desativado.

Simulação reativa com radiação: Depois que a combustão foi totalmente desenvolvida na câmara, o modelo de radiação é reativado, mas ainda sem incluir o efeito da fase discreta sobre a radiação.

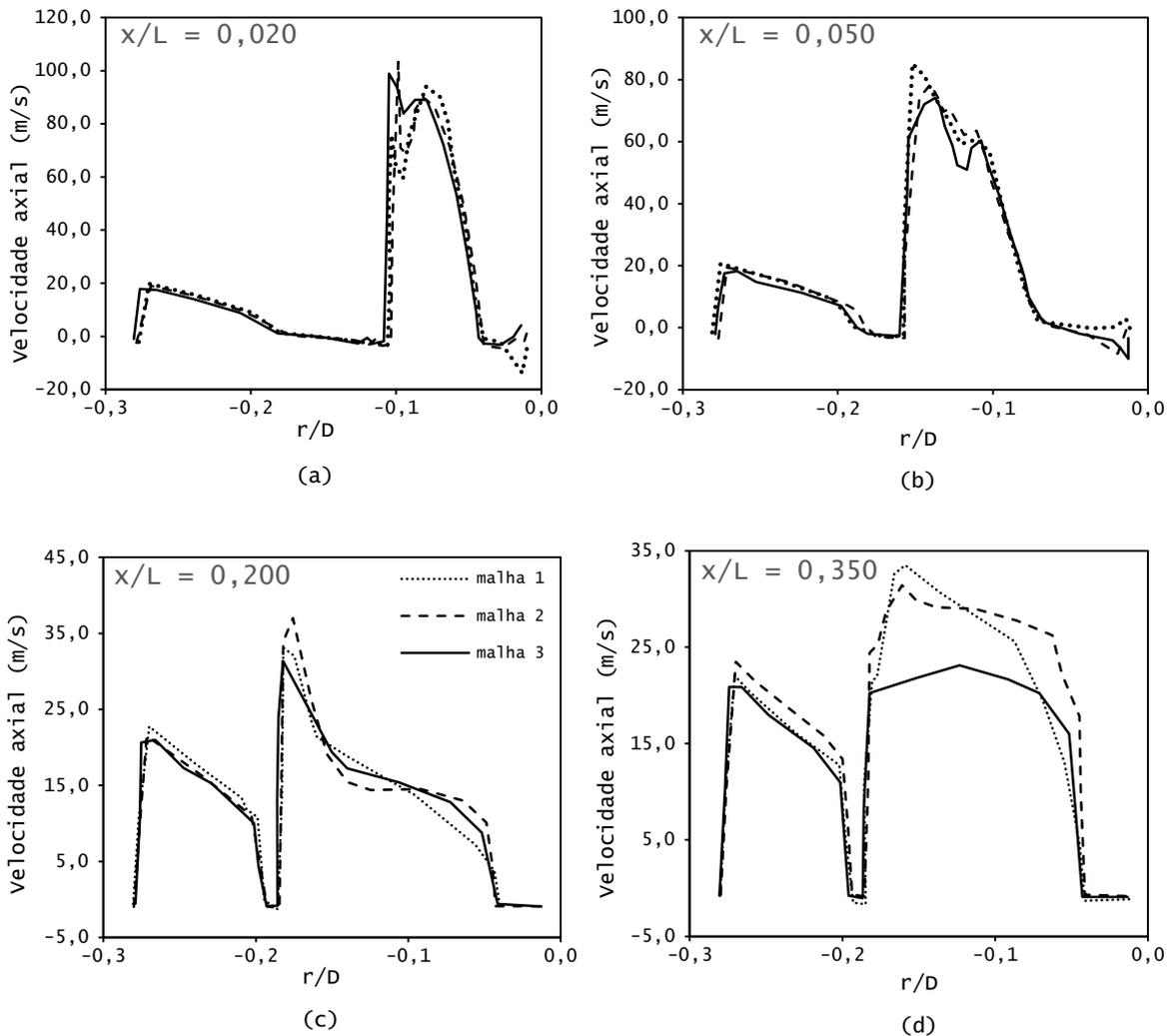
Simulação radiativa com efeitos da radiação nas partículas: As últimas iterações na simulação tomam em conta os efeitos de todos os modelos configurados. Para isto, é ativada a interação das partículas com a radiação dentro do modelo de fase discreta DPM. Deve-se realizar várias iterações até obter a solução convergida final.

5.5 Resultados da independência de malha

Para as simulações de independência de malha, as simulações foram realizadas sem reações de combustão, avaliando unicamente a fluidodinâmica dentro da câmara. No estudo foi considerado a geometria completa da câmara de combustão, pois foi mencionado no Capítulo 2 deste texto que escoamentos rotacionais podem ou não ser simétricos com relação à linha central, devido às zonas de recirculação no interior da câmara. Foram comparadas curvas de velocidade axial em diferentes planos a jusante do *swirler* e curvas de temperatura na saída da câmara de combustão. O modelo de turbulência utilizado no estudo de independência de malha foi o RMS.

A Figura 5.3 mostra as curvas de velocidade axial como resultados das simulações do estudo de independência de malha realizadas em três malhas diferentes, cada figura mostrada foi medida a uma certa distância a jusante do *swirler*. A Figura 5.3 (a), por exemplo, foi levantado a partir dos dados da velocidade axial a 0,020 m a jusante do *swirler*.

Figura 5.3- Velocidade axial a diferentes distâncias a jusante do *swirler* para o estudo de independência de malha (a) 0,020 m, (b) 0,050 m, (c) 0,200 m e (d) 0,350 m.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Nota-se que os perfis de velocidade axial resultantes das três malhas testadas têm comportamento semelhante com leves diferenças, só na Figura 5.3 (d) observa-se uma diferença notória que corresponde à malha menos refinada e para uma distância de 0,350 m do *swirler*. Portanto, qualquer uma das três malhas pode ser utilizada para realizar as simulações da câmara de combustão ciclônica.

Com relação ao tempo gasto nas simulações de independência de malha, para cada malha testada o tempo e o número de iterações foi diferente. Utilizando um computador com 16 núcleos Intel i7-4970 CPU de 3,60 GHz e 16GB de memória RAM obteve-se os seguintes tempos de simulação, mostrados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3- Tempos de simulação nos casos de independência de malha

Malha	Número de elementos	Tempo de CPU para 1000 iterações	Número de iterações
Malha 1	3.733.390	~ 3h 35min	~ 29500
Malha 2	3.165.009	~ 3h 3min	~ 32000
Malha 3	3.055.527	~3h 52min	~ 28000

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Embora o tempo computacional gasto na simulação com a malha 3 foi maior que com a malha 1 e a malha 2, acredita-se que o esforço computacional nas simulações com as reações de combustão e radiação ativadas será muito grande para as malhas mais refinadas. Portanto, decidiu-se utilizar a malha 3 (menos refinada) para realizar as simulações da câmara de combustão ciclônica.

As simulações da fluidodinâmica e de combustão da câmara ciclônica foram realizadas no cluster do laboratório de simulação LABSIM da UNIFEI e utilizou-se 64 núcleos de processamento com aproximadamente 128 GB de memória RAM. Com esta capacidade computacional, as simulações foram mais rápidas, totalizando aproximadamente 56.000 iterações para a simulação com o modelo SST $k-\omega$, 52.000 iterações para a simulação com o modelo *Realizable* $k-\epsilon$ e 95.000 iterações com o modelo RNG $k-\epsilon$. Para o modelo RMS na simulação unicamente da parte da fluidodinâmica foram realizadas 25.000 iterações. O número elevado de interações registrado com o modelo RNG $k-\epsilon$ foi porque não se conseguiu convergência com o parâmetro e os residuais monitorados, e na espera da convergência deixou-se rodar bastantes iterações. A convergência com o modelo RNG $k-\epsilon$ foi realizada pelo critério de balanço de massa.

Durante as simulações com os diferentes modelos de turbulência foram configurados gráficos de monitoramento da evolução da temperatura dos gases na saída da câmara ciclônica, o balanço de massa nas entradas e a saída da câmara, com o objetivo de acompanhar a convergência das simulações, além do monitoramento dos valores dos residuais.

No seguinte capítulo serão mostrados e analisados os resultados obtidos das simulações, tanto da parte da fluidodinâmica como da parte reativa da câmara de combustão ciclônica.

Capítulo 6

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo apresenta-se os resultados das simulações com a correspondente descrição e discussão destes resultados, comparando-os com os conceitos e observações estudados nos capítulos anteriores. Os resultados numéricos foram classificados em duas partes, uma parte está relacionada com as simulações isotérmicas ou comumente denominada simulações não-reativas, que é realizada sem a parte da combustão e permite avaliar o escoamento dentro do domínio para determinar as características e condições adequadas para o estabelecimento da chama de combustão. A segunda parte dos resultados inclui a combustão e mostra detalhadamente os resultados de temperatura, concentração de espécies, porcentagem da queima e tempo de residência das partículas, entre outros.

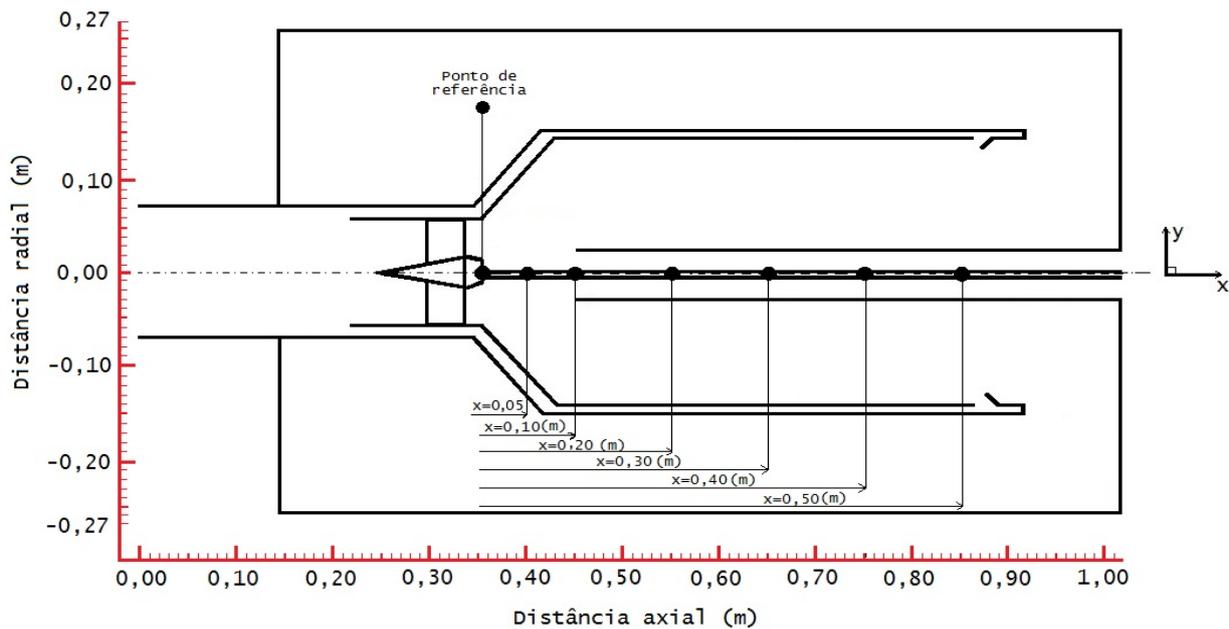
6.1 Resultados não-reativos

Conforme explicado no Capítulo 2, muitos investigadores recomendam a utilização de modelos de turbulência como o RMS ou LES quando se trata de escoamentos rotacionais elevados, no entanto essa conclusão depende do tipo de combustão aplicado e outros fatores como o tamanho e dimensões do combustor, as entradas das correntes primárias e secundárias que promovem as zonas de recirculação, a vazão mássica dos gases ou velocidade do escoamento entre outros. Neste estudo, foi realizado as simulações utilizando os modelos de turbulência (justificados devidamente no Capítulo 2 deste texto) *Realizable* $k-\epsilon$, RNG $k-\epsilon$, SST $k-\omega$ e RMS. Tratando-se de investigações numéricas iniciais desta câmara de combustão, os resultados avaliaram implicitamente estes modelos de turbulência com relação à sua adequação para a simulação desta câmara ciclônica em estudo, e a partir disso pode-se partir para modelos de turbulência mais complexos em estudos futuros.

A velocidade axial é um dos parâmetros importantes que devem ser avaliados em câmaras de combustão ciclônicas, após a geração da componente rotacional no escoamento,

espera-se que a velocidade axial diminuía em posições a jusante até velocidades próximas da velocidade de chama para permitir a formação da chama. Desta forma, para avaliar a velocidade axial dentro da câmara de combustão foi realizado gráficos em diferentes distancias axiais a partir do *swirler* (ponto de referência). Para ajudar a identificar os locais de medição, mostra-se na Figura 6.1 os pontos escolhidos estrategicamente ao longo do combustor.

Figura 6.1- Pontos referencias para curvas de velocidades axial.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Na Figura 6.2 (a), mostra-se as curvas de velocidade axial em função da distância radial para os diferentes modelos de turbulência testados. Em contraste com as curvas de velocidade axial, as curvas de velocidade tangencial são mostrada ao lado nas Figura 6.2 (b).

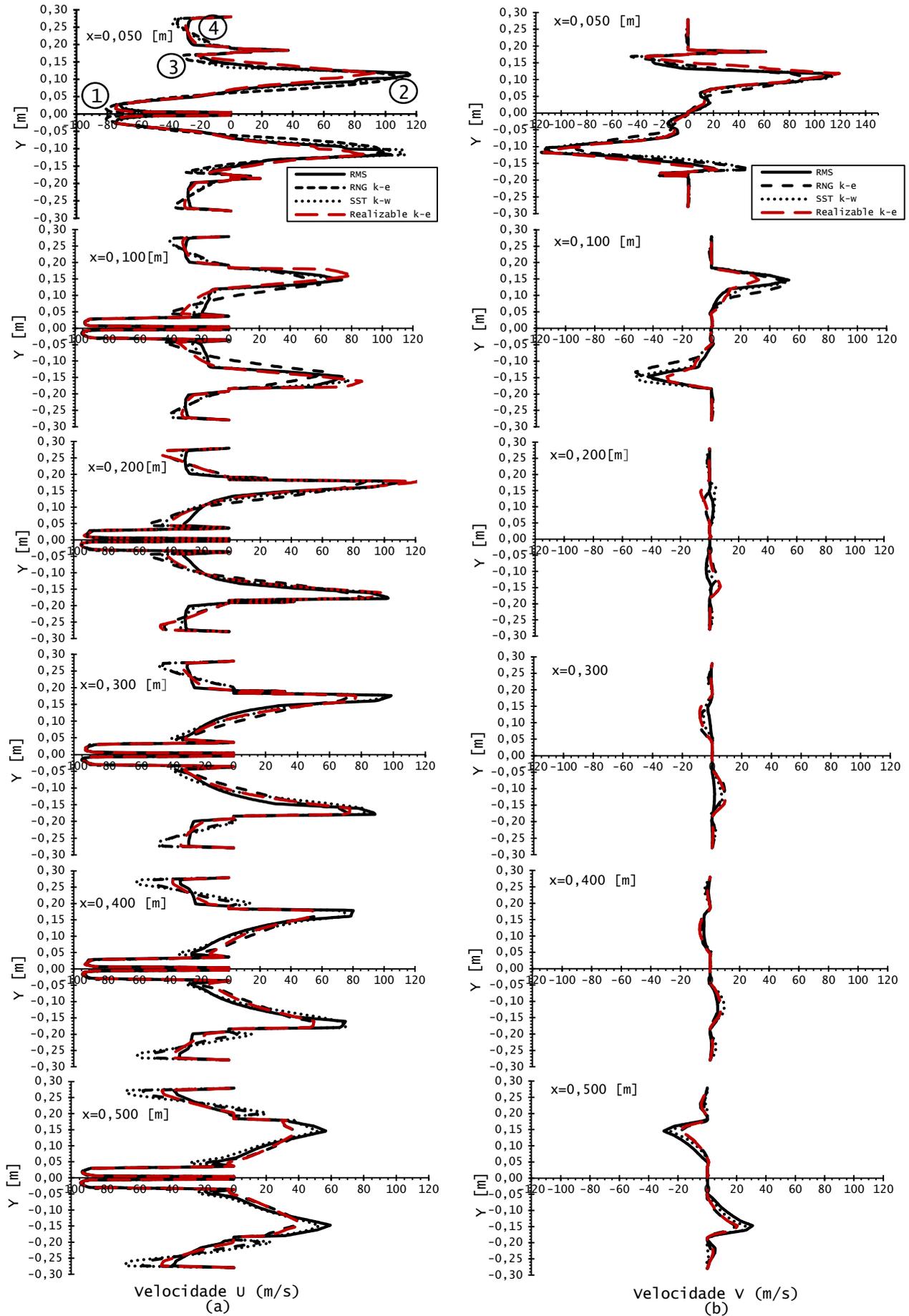
A partir das Figuras 6.2 aprecia-se perfis de velocidade axial similares para todos os modelos de turbulência, mas com variações nos valores, principalmente nos picos das curvas. Pode-se observar quatro picos bem marcados nas curvas (estes picos são identificados em números na primeira Figura 6.2), o primeiro pico de velocidade é próximo da linha do eixo axial ($y=0$) e tem direção contrária à direção x positiva, porque corresponde à velocidade do ar que transporta as partículas combustíveis pelo tubo de biomassa que é contracorrente ao ar primário de combustão. Na posição $x=0,050$ m a jusante do *swirler*, o ar transportador já abandonou o tubo de biomassa e o valor aproximado da velocidade é de -80 m/s. Em todas as outras posições dentro do tubo de biomassa, ou seja, de $x=0,100$ a

$x=0,500$ m a velocidade do ar transportador tem um perfil uniforme, porque se encontra confinado nas paredes do tubo de biomassa e tem valor aproximado de -95 m/s. O valor da velocidade do ar de transporte é menor do que o valor da corrente de ar primário quando os dois se encontram logo depois do *swirler*, portanto o ar primário deve arrastar o ar transportador e as partículas de biomassa.

O segundo pico nas curvas de velocidade axial corresponde a velocidade do ar primário perto das paredes do combustor. Na posição $x=0,050$ m a velocidade axial perto das paredes do combustor é elevado após passar pelo *swirler*, os modelos RMS e SST $k-\omega$ registraram velocidades axiais com valor aproximado de 115 m/s e os modelos *Realizable* $k-\epsilon$ e RNG $k-\epsilon$ velocidades de 95 a 100 m/s. Observa-se que a velocidade da corrente principal vai-se dissipando na direção axial em todos os modelos, os modelos RMS e SST $k-\omega$ registraram valores similares e próximos a 100 m/s em $x=0,300$ m, 80 m/s em $x=0,400$ m e de 55 m/s em $x=0,500$ m. Já os modelos RNG $k-\epsilon$ e *Realizable* $k-\epsilon$ também são similares nos seus valores com aproximadamente 75 m/s em $x=0,300$, 55 m/s em $x=0,400$ e 38 m/s em $x=0,500$. Essas três últimas posições são de interesse, porque espera-se que a velocidade axial seja baixa e permita o ancoramento da chama. Como referência, sabe-se que em câmaras de combustão de turbinas a gás a velocidade axial próxima da chama está entre 20 a 30 m/s (LEFEBVRE e BALLAL, 2010). Com essa referência, inicialmente os modelos RNG $k-\epsilon$ e *Realizable* $k-\epsilon$ registraram velocidades axiais com valor menor a 40 m/s na saída do combustor.

Ainda na Figura 6.2 (a) em $x=0,050$ m, antes da parede do combustor aprecia-se uma queda rápida na velocidade axial da corrente principal positiva a um valor negativo aproximado de -30 m/s (identificado pelo pico 3 na Figura 6.2), devido que nessa posição forma-se uma zona de recirculação entre o *quarl* e a parede do combustor acima da corrente principal do ar primário. Esta zona de recirculação será apreciado melhor nos contornos de velocidade apresentadas nas Figuras 6.3. Nas outras posições ($x=0,100$ a $x=0,500$) a zona de recirculação acima da corrente principal não aparece mais, no entanto aparece uma zona recirculação abaixo da corrente principal e muito próximo da parede do tubo de biomassa. Esta zona de recirculação é a principal dentro do combustor e registra valores de velocidade de -40 m/s e diminui até -20 m/s nas posições $x=0,400$ m/s e $x=0,500$ m/s nos modelos *Realizable* $k-\epsilon$, SST $k-\omega$ e RMS, no modelo RNG $k-\epsilon$ o valor dessa velocidade chega a -60 m/s e diminui até -30 m/s em $x=0,500$.

Figura 6.2- Perfis de velocidade na câmara de combustão ciclônica, (a) Velocidade axial e (b) velocidade tangencial.



O pico número 4 tem direção negativa porque corresponde ao escoamento do ar dirigindo-se à saída da câmara de combustão. Nas posições $x=0,050$ a $x=0,300$ os valores da velocidade se aproximam de -35 a -40 m/s nos modelos RMS e *Realizable* $k-\varepsilon$ e nos modelos RNG $k-\varepsilon$ e SST $k-\omega$ tem um valor de -40 a -55 m/s. Nas posições $x=0,400$ e $x=0,500$ este pico de velocidade aumenta por conta de que a velocidade na saída do combustor aumenta pela adição do ar de resfriamento que entram pelos orifícios de resfriamento, o que provoca maior turbulência e conseqüentemente aumenta a velocidade a jusante desse ponto.

Com relação à velocidade tangencial, os perfis de velocidade nas diferentes posições podem ser vistas na Figura 6.2 (b). Da mesma forma que a componente axial, a componente tangencial da velocidade é elevada na posição $x=0,050$, logo após o *swirler*, os modelos de turbulência se aproximam na representação dos perfis, mas os valores também diferem levemente. Da mesma forma, podem ser observados nessa posição as mesmas características das curvas de velocidade axial, incluindo a zona de recirculação entre o *quarl* e a parede do combustor. Nas outras posições vê-se que a componente tangencial da velocidade se dilui rapidamente com relação ao componente axial, em $x=0,200$ a componente tangencial é baixa com valor aproximado a 10 m/s e muda de direção devido à zona de recirculação, isto mostrado pelos modelos RNG $k-\varepsilon$ e *Realizable* $k-\varepsilon$. O modelo SST $k-\omega$ e RMS mostram um valor próximo de 5 m/s na direção positiva. Em $x=0,400$ todos os modelos têm valores similares e o mesmo perfil. Outra vez, em $x=0,500$ o componente tangencial da velocidade aumenta pela proximidade dos *holes* de resfriamento. Aprecia-se que o escoamento perto da saída da câmara de combustão não tem mais componente tangencial, ao igual que no tubo de biomassa.

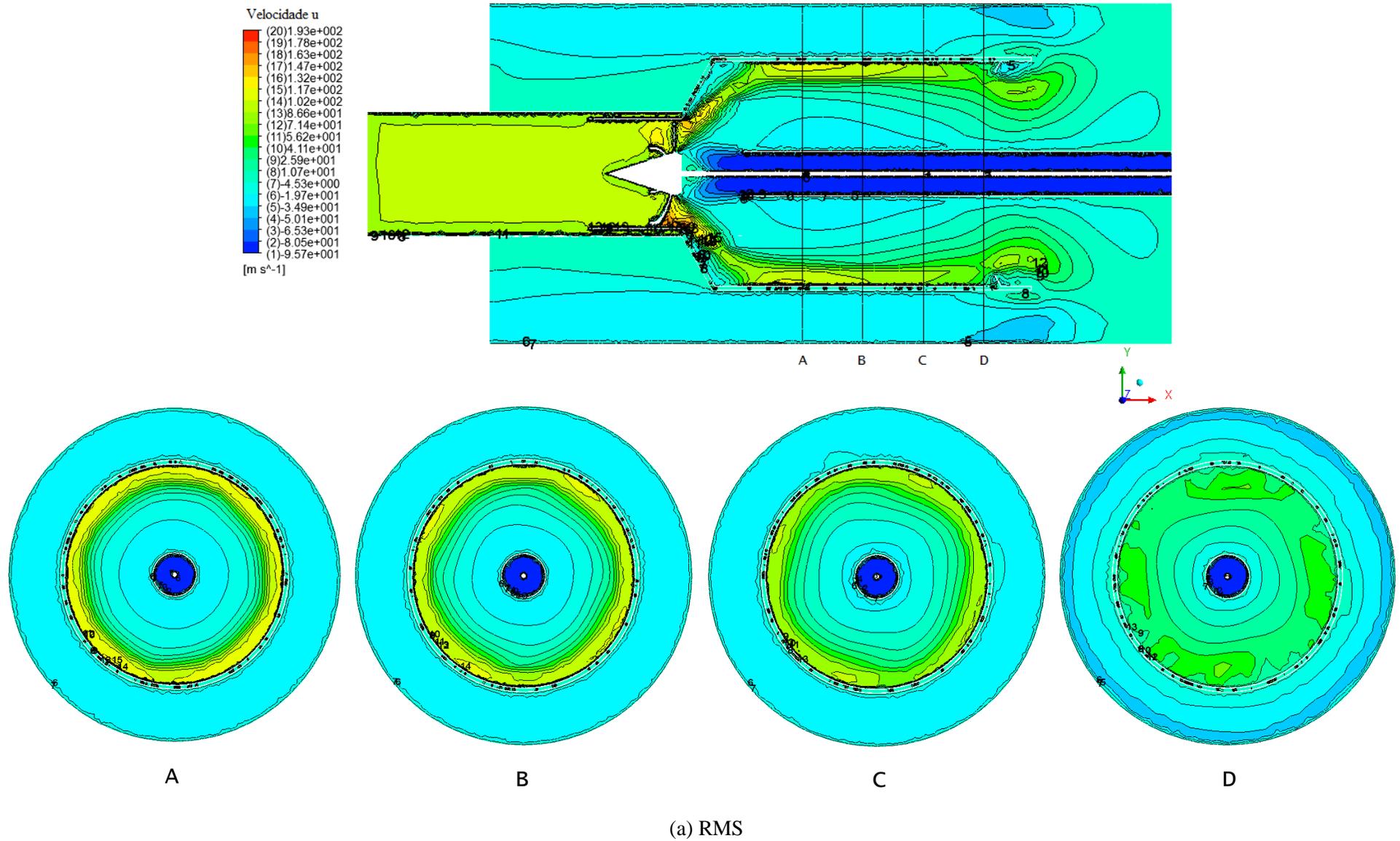
As curvas de velocidade axial e tangencial descreveram perfeitamente o comportamento do escoamento do fluido dentro da câmara ciclônica, e para ajudar a compreender melhor a distribuição desses parâmetros fluidodinâmicos, as Figuras 6.3 (a) a 6.3 (d) mostram em detalhe os contornos de velocidade axial em um plano de corte frontal da câmara (parte superior) e em planos de corte transversais (parte inferior) identificados com as letras A, B, C e D correspondentes aos pontos $x=0,200$ m, $0,300$ m, $0,400$ m e $0,500$ m a jusante do *swirler* para cada um dos modelos de turbulência testados. Nas figuras da parte superior, os contornos de velocidade definem com clareza as zonas de recirculação registrados em cada um dos modelos testados. Segundo a legenda de cores das Figuras 6.3 a cor azul e azul claro têm valores negativos indicando que o escoamento tem direção oposta às linhas de corrente principal indicados pelas cores verde, amarelo e vermelho, portanto

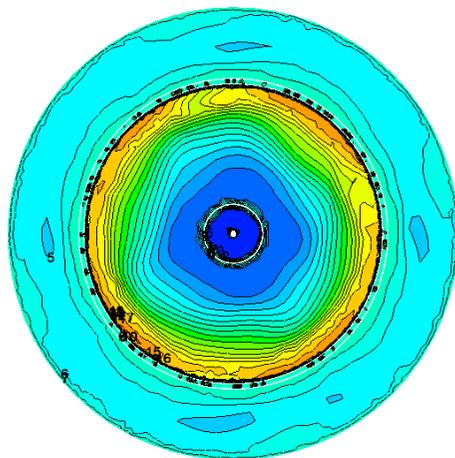
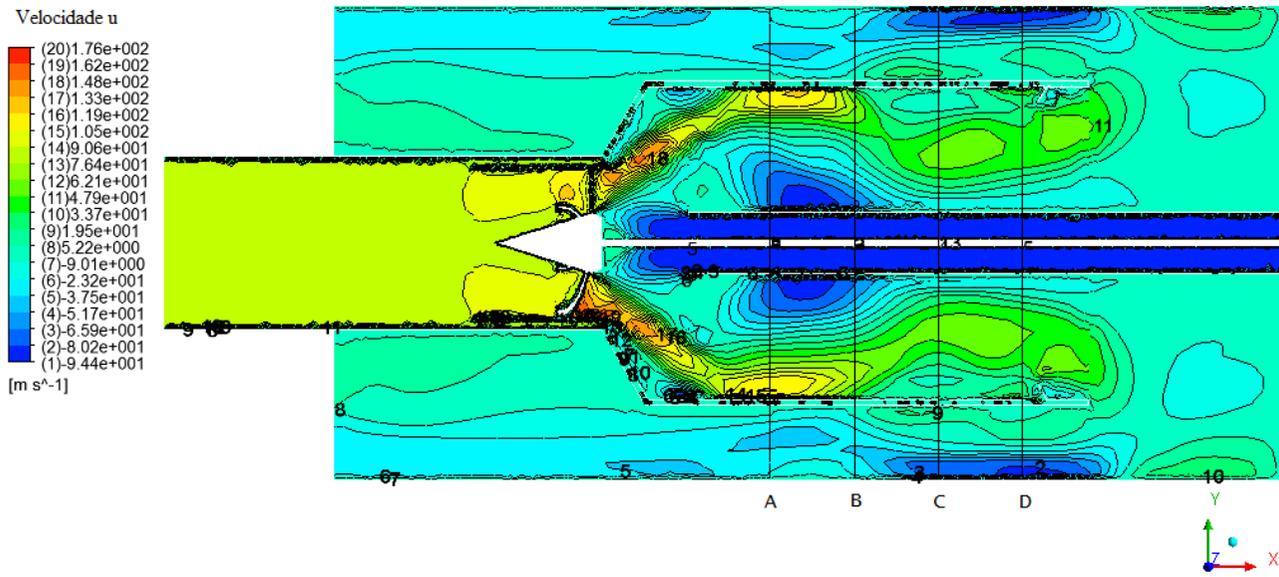
permitem identificar claramente as zonas de escoamento reverso. Observa-se ao todo quatro zonas de recirculação, uma zona de recirculação pequena localizada entre o *quarl* e a parede do combustor mostrada também pelas curvas de velocidade axial, uma zona de recirculação grande dentro do combustor limitado pelo tubo de biomassa e a corrente de ar principal, uma zona de recirculação na parte posterior da câmara após a saída do combustor e uma zona de escoamento reverso de baixa velocidade perto da saída da câmara.

A zona de recirculação principal identificada pelas regiões de cor azul claro é simétrica e seu comprimento ocupa a maior parte do combustor em cada um dos modelos de turbulência testados. Nota-se que as zonas de recirculação registradas pelos modelos RMS, RNG k- ϵ e SST k- ω não são fechadas e se estendem até fora do combustor, conectando-se com a zona de recirculação da zona posterior da câmara. Esta conexão pode permitir a troca de oxigênio, espécies voláteis ou calor para dentro ou para fora da zona principal e do combustor. Os valores de velocidade nesta região são de -35 m/s a -20 m/s ao longo da zona de recirculação para o modelo RMS, de -50 m/s a -35 m/s no modelo SST k- ω e de -48 m/s a -32 m/s no modelo *Realizable* k- ϵ . É interessante observar que a entrada de ar pelos orifícios de resfriamento ajudam a encapsular e definir o formato das zona de recirculação dentro do combustor. Isso mostra o impacto que pode ter a orientação das aletas dos orifícios na formação da zona de recirculação principal, ou seja, um ângulo de abertura menor ou maior das aletas poderiam direcionar os jatos mais para o centro ou para fora do combustor, e isto poderia diminuir o comprimento da zona de recirculação ou provocar perturbações no escoamento. Considerando que na configuração atual da câmara este ângulo de abertura é de 60 graus.

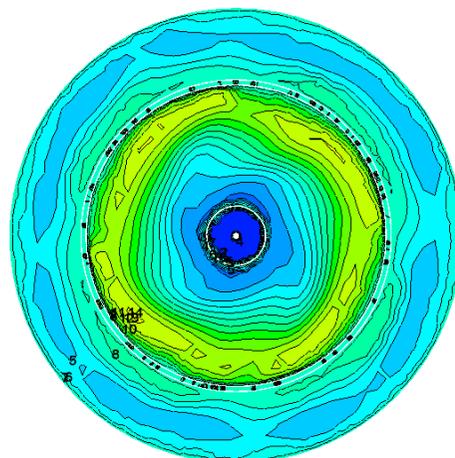
Adicionalmente, nos planos transversais da parte inferior da Figura 6.3 pode-se observar em detalhe a largura e formato das zonas de recirculação dentro do combustor. A largura das zonas de recirculação registrado por cada modelo de turbulência indicam zonas concêntricas em volta do tubo de biomassa e mostram em detalhe a mudança no formato das zona de recirculação ao longo do combustor. A diminuição da velocidade axial em cada um dos planos visualizados também é notório em cada um dos modelos testados.

Figura 6.3- Contornos de velocidade axial. Simulações com o modelo (a) RMS, (b) RNG k- ϵ , (c) SST k- ω , (d) *Realizable* k- ϵ

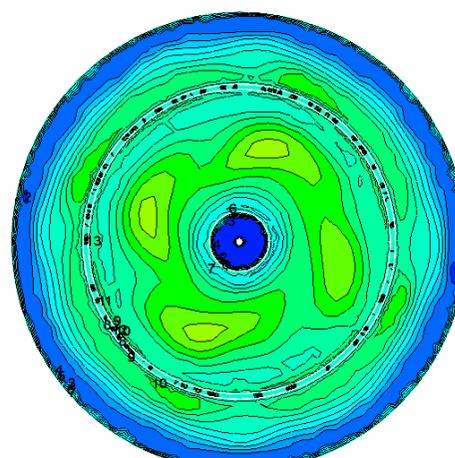




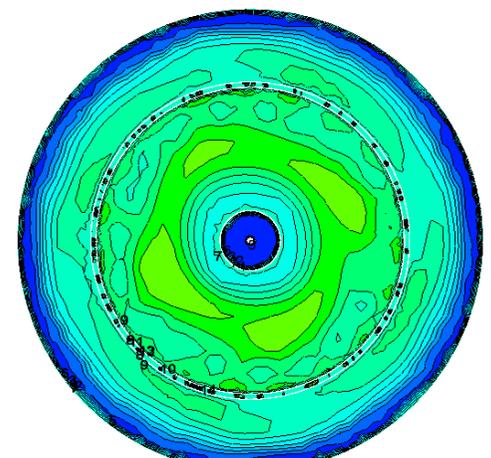
A



B

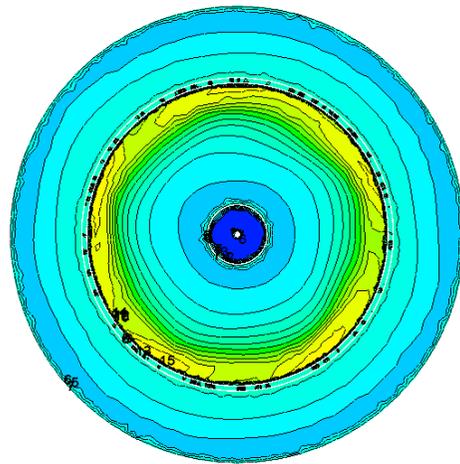
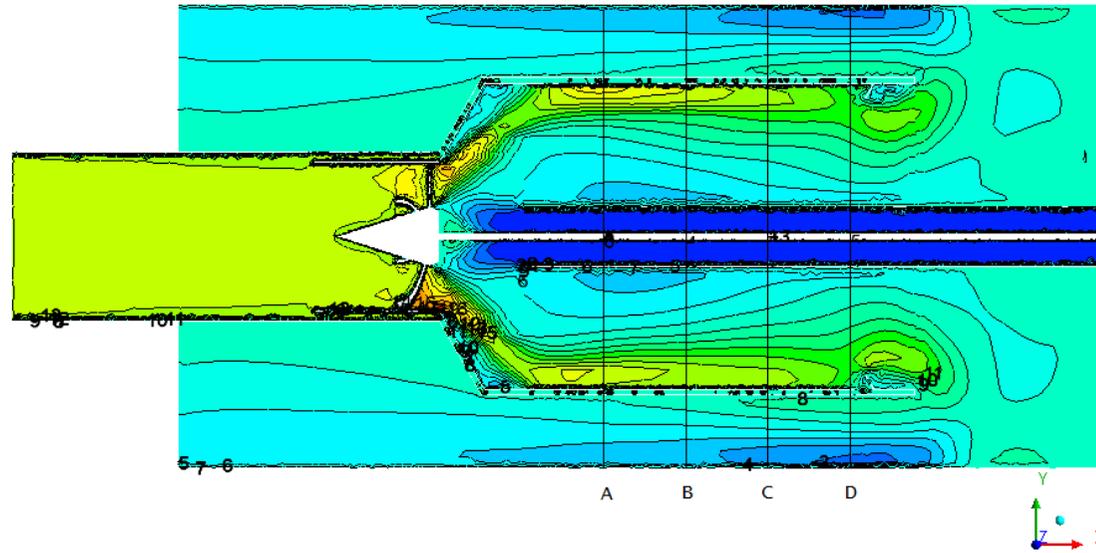
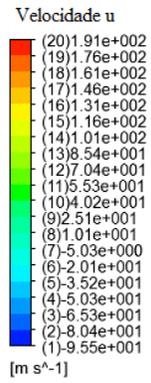


C

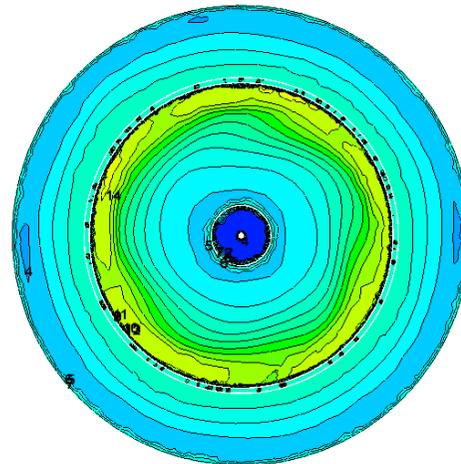


D

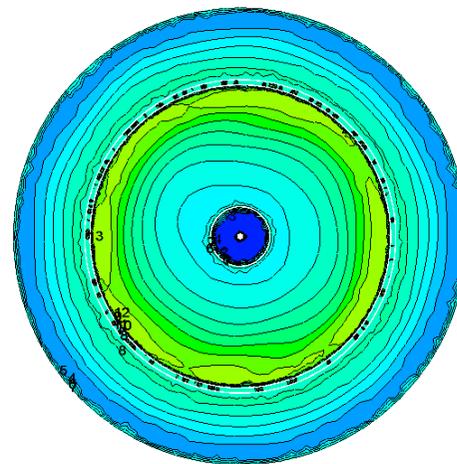
(b) RNG k- ϵ



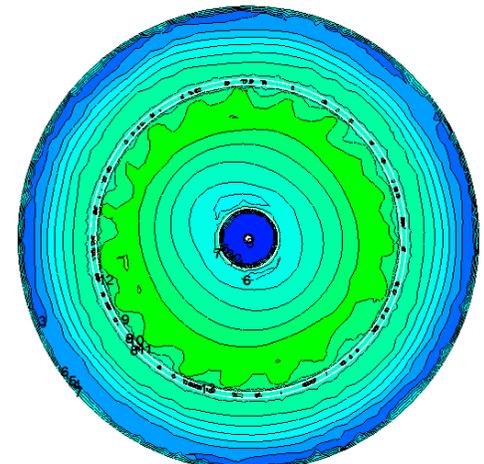
A



B

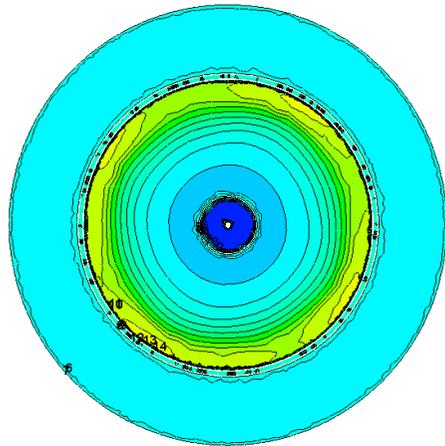
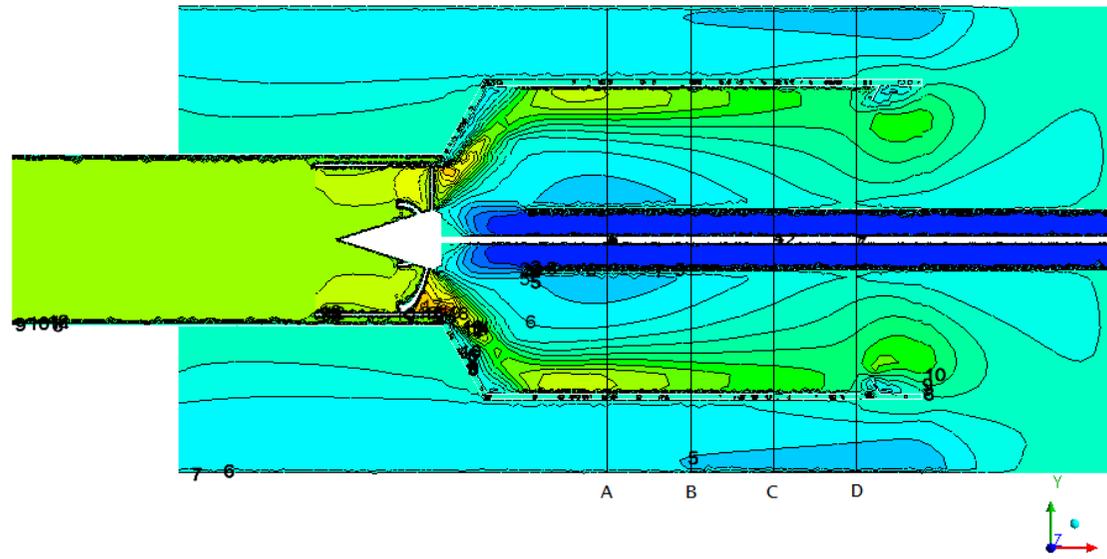
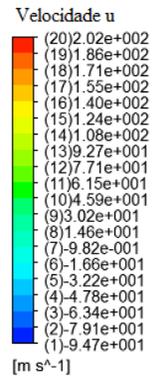


C

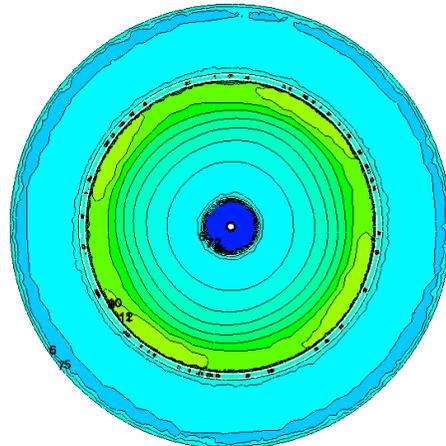


D

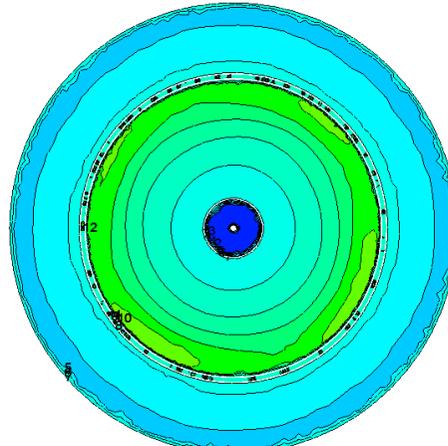
(c) SST k- ω



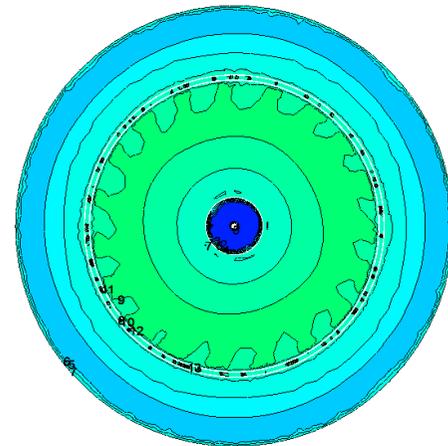
A



B



C



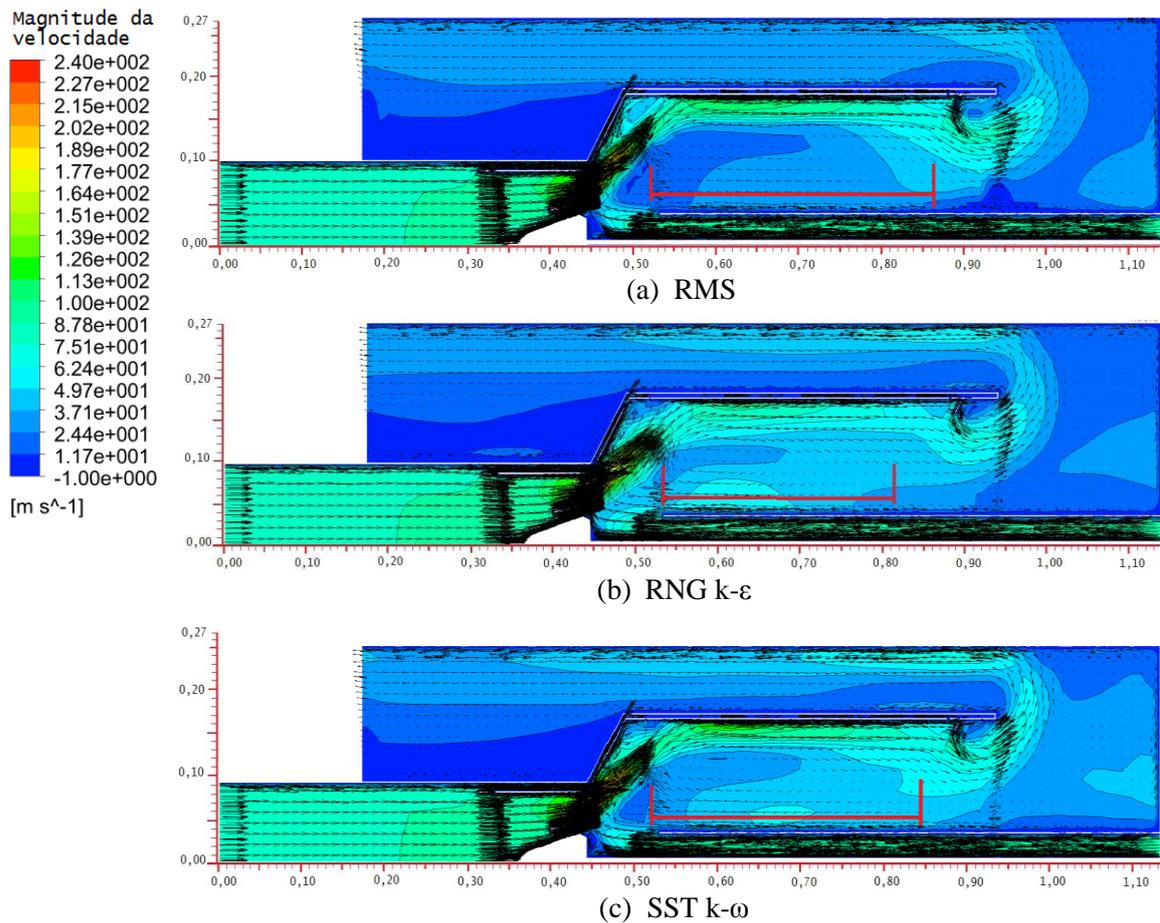
D

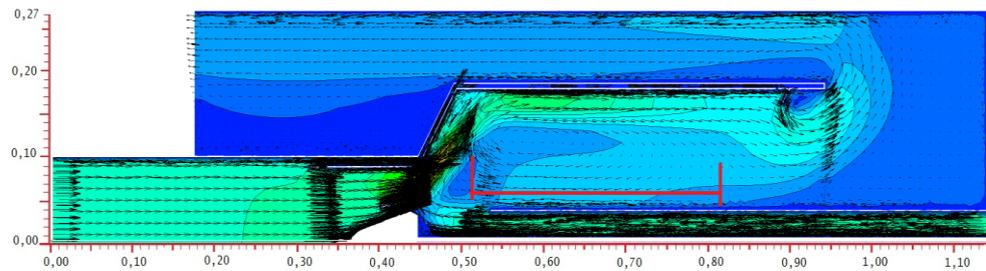
(d) *Realizable k-ε*

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Com o objetivo de visualizar melhor o comprimento das zonas de recirculação descritas inicialmente pelos perfis e contornos de velocidade axial, é visto nas Figuras 6.4 os vetores de velocidade sobreposto em gráficos dos contornos da magnitude de velocidade, e colocados em uma escala representativa (não é exatamente a escala da câmara de combustão) para poder comparar o tamanho das zonas de recirculação previstos pelos diferentes modelos de turbulência. Ao colocar os contornos da magnitude de velocidade leva-se em conta o componente tangencial e radial da velocidade. Os vetores de velocidade estão representados pelas setas de cor preto e se fazem mais evidentes em regiões da câmara onde a velocidade é elevada. As linhas vermelhas indicam o tamanho ou comprimento das zonas de recirculação registrados por cada modelo testado.

Figura 6.4- Comparação do tamanho das zonas de recirculação previstas pelos diferentes modelos de turbulência, (a) RMS, (b) RNG k- ϵ , (c) SST k- ω e (d) *Realizable* k- ϵ .





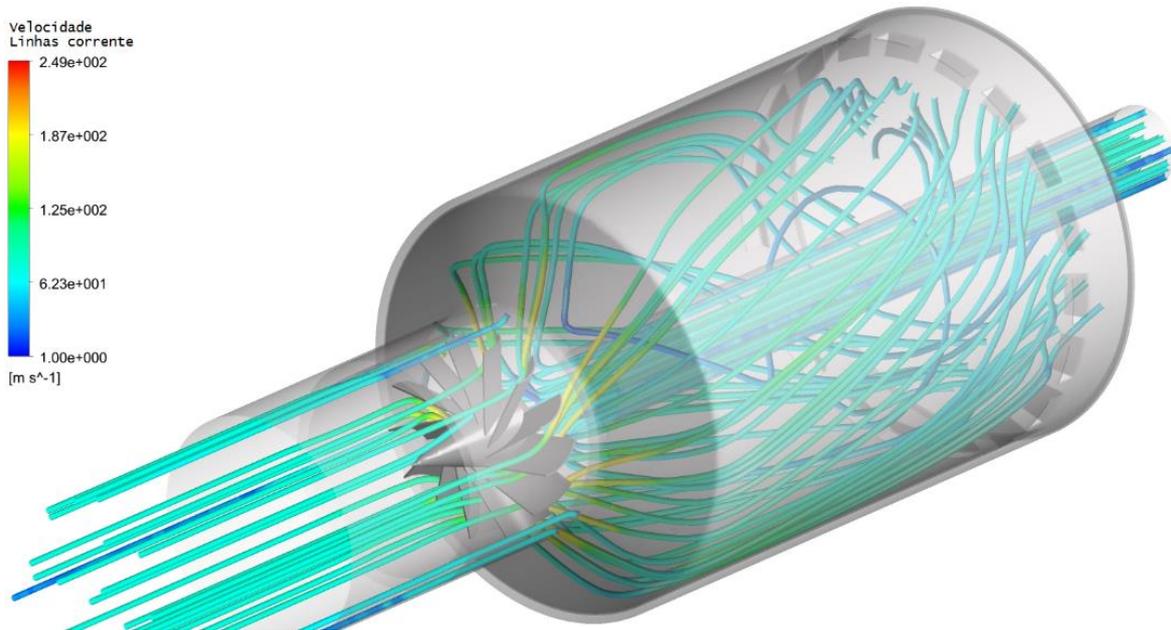
(d) *Realizable* k- ϵ

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Na Figura 6.4 o modelo RMS registra uma zona de recirculação grande ocupando a maior parte do combustor. No modelo RNG k- ϵ esta zona de recirculação é menor em comprimento que o do modelo RMS, mas observa-se que a recirculação é mais definida enquanto a sua forma. O modelo SST k- ω registra uma zona de recirculação grande com o centro da recirculação deslocada mais para o centro do combustor em comparação com o modelo RNG k- ϵ , por exemplo, e também é mais definida e uniforme que o modelo RMS. No modelo *Realizable* k- ϵ observa-se uma zona de recirculação menor, muito semelhante a do modelo RNG k- ϵ em tamanho e na uniformidade que apresenta com o seu centro de recirculação deslocada mais para o lado do *quarl*.

Outro tipo de gráfico comum no estudo da fluidodinâmica de qualquer dispositivo de engenharia é a visualização das linhas de corrente fluidas, porque permitem observar as trajetórias das partículas fluidas. A Figura 6.5 mostra as linhas de corrente dentro do combustor coloridas pela magnitude da velocidade, e é mostrada unicamente 25 linhas de corrente para uma visualização melhor. A Figura 6.5, desde essa perspectiva mostra principalmente a trajetória das partículas fluidas direcionadas pelo *swirler* quando o fluido passa através das pás, e posteriormente é guiado pelo *quarl*. Observa-se também que as linhas de corrente do ar de transporte ficam nas camadas inferiores e as linhas de corrente do ar primário nas camadas superiores.

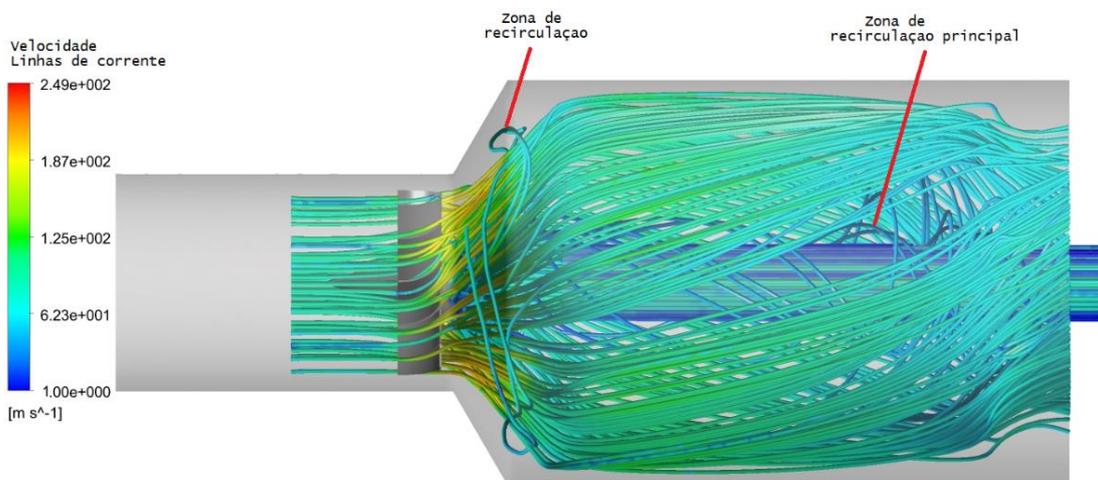
Figura 6.5- Linhas de corrente dentro do combustor coloridas pela magnitude da velocidade tiradas do modelo RMS.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Aumentar a visualização de uma maior quantidade de linhas de corrente fluidas dentro do combustor, como mostra a Figura 6.6, coloca em evidência as zonas de recirculação já observadas nas Figuras 6.2 e Figuras 6.3. As duas zonas de recirculação identificadas na Figura 6.6 são formadas a partir das camadas de cisalhamento, a zona de recirculação do *quarl* é originada pelo cisalhamento externo e a zona de recirculação principal pelo cisalhamento interno.

Figura 6.6- Zonas de recirculação dentro do combustor identificadas pelas linhas de corrente obtidas para o modelo RMS.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Foi realizada até aqui a discussão dos resultados da fluidodinâmica da câmara de combustão ciclônica. A análise das Figuras 6.2 a Figura 6.6 realizada nesta seção permitiu avaliar a distribuição de velocidades dentro da câmara de combustão, e identificar principalmente as zonas de recirculação características dos escoamentos rotacionais. A partir dos resultados das simulações da fluidodinâmica, pode-se concluir parcialmente que a zona de recirculação registrada pelo modelo RMS pode ancorar a chama dentro do combustor, porque as velocidades axiais nessa região reversa oscilam entre -35 m/s e -20 m/s que estão dentro da faixa das velocidades de referência mencionados anteriormente. Já os modelos SST k- ω e *Realizable* k- ϵ mostram velocidades axiais elevadas (entre -50 m/s a -20 m/s) nas zonas de recirculação, portanto não são adequados para a formação da chama.

6.2 Resultados reativos

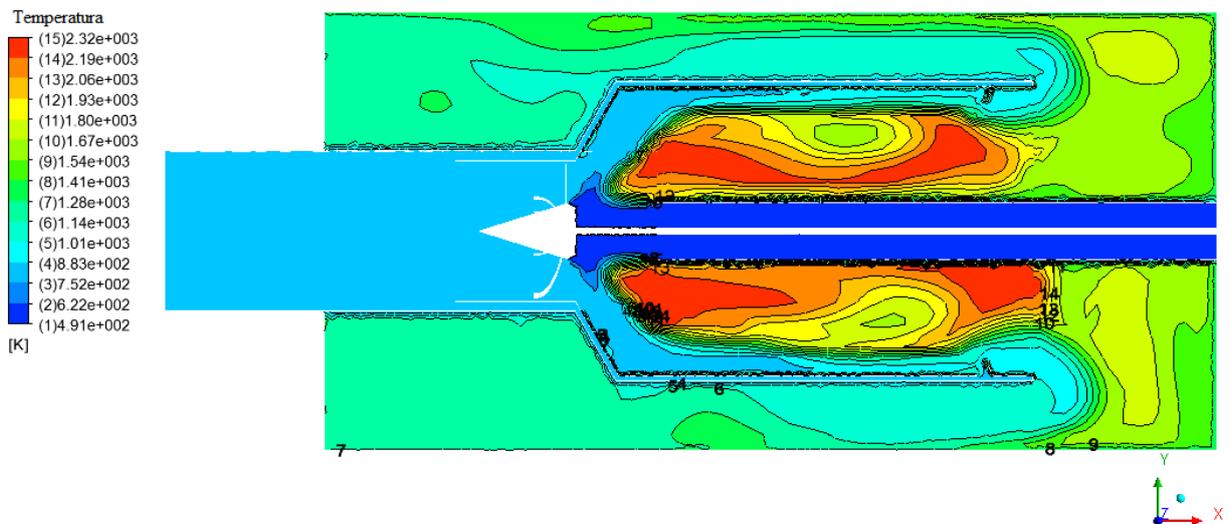
Após a convergência das simulações não reativas com os diferentes modelos de turbulência, realizou-se as simulações reativas. Sobre os resultados convergidos das simulações não reativas, ativou-se o modelo de Transporte de Espécies e o modelo DPM das partículas combustíveis, além disso definiu-se uma região (dentro do combustor) de alta temperatura e alta concentração de espécies de H₂O e CO₂ para iniciar a combustão com apenas uma iteração. Após essa única iteração, os fatores de relaxação para o modelo DPM abaixaram para não diluir a região quente e configurou-se a quantidade de iterações necessárias para a convergência. Após a convergência com essas configurações, ativou-se o modelo de radiação Ordenadas Discretas e simulou-se até a nova convergência. Finalmente, a iteração entre partículas e radiação foi ativada e simulada até a convergência, finalizando assim a simulação reativa da câmara de combustão ciclônica.

A simulação reativa com o modelo de turbulência RMS não deu certo devido a problemas de divergência. Tentou-se consertar esse problema de diferentes formas, utilizando diferentes configurações, diferentes esquemas de discretização, fatores de relaxação e também testou-se a malha mais refinada testada na independência de malha, com a ideia de que o problema pudesse ser o fato do modelo RMS tentar representar as menores flutuações de turbulência, e pela qual iria precisar de uma malha mais refinada, mas o problema de divergência persistiu. Portanto, não obteve-se resultados com o modelo RMS. Os resultados que se apresentam a continuação são dos modelos RNG k- ϵ , SST k- ω e *Realizable* k- ϵ .

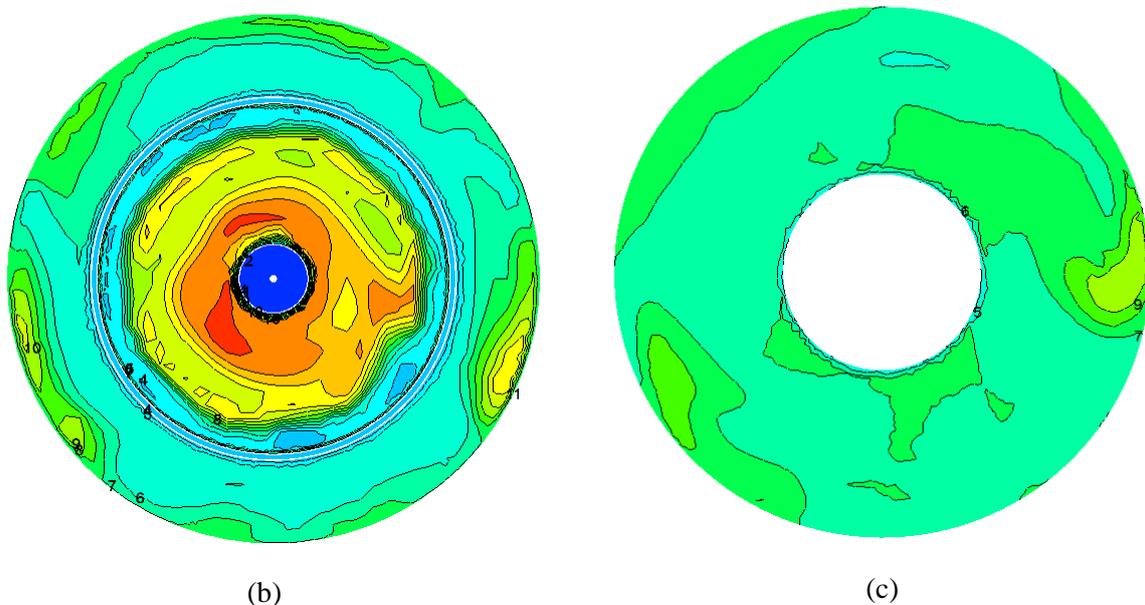
Assim, em planos de corte frontal (letra ‘a’) e planos de corte transversal (letras ‘b’ e ‘c’) das Figuras 6.7, Figura 6.8 e Figura 6.9, mostram-se os contornos de temperatura dentro da câmara de combustão para os modelos de turbulência RNG k- ϵ , SST k- ω e *Realizable* k- ϵ , respetivamente. As figuras dos planos transversais (b) e (c) das Figuras 6.7 a 6.9 mostram os contornos de temperatura no lugar da formação da chama e na saída da câmara de combustão.

Os contornos de temperatura revelaram a região dentro da câmara onde a chama se estabeleceu, assim observa-se que unicamente no modelo RNG k- ϵ a chama formou-se dentro do combustor. No modelo SST k- ω a chama deu sinais de formação dentro do combustor, mas foi deslocada para fora do combustor. Por sua vez, no modelo *Realizable* k- ϵ a chama formou-se na parte posterior da câmara de combustão, na região onde foi identificada uma das zonas de recirculação.

Figura 6.7- Contorno de temperatura para a simulação do modelo RNG k- ϵ , (a) plano de corte frontal, (b) na região da chama e (c) na saída da câmara de combustão.



(a)

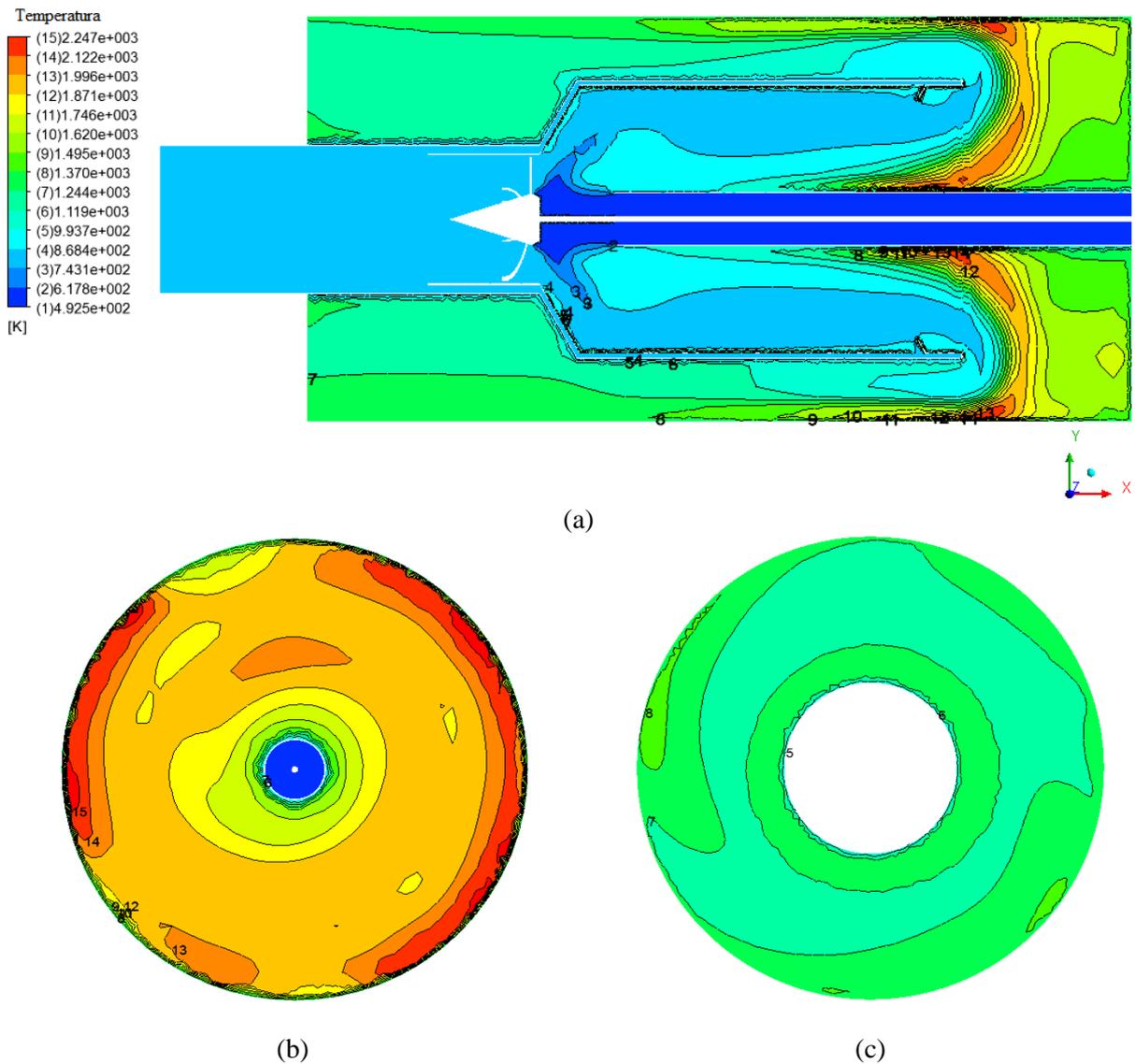


Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Embora no modelo RNG $k-\epsilon$ a chama formou-se dentro da região esperada ou teoricamente prevista, observa-se nas Figura 6.7 (a) e (b) que a chama formada parece instável, porque não é simétrica em volta do tubo de biomassa e apresenta gradientes de temperaturas não uniformes dentro da câmara de combustão, principalmente na região da saída da câmara, como se observa na Figura 6.7 (c). E ainda, durante as simulações ocorreram problemas de convergência com o modelo RNG $k-\epsilon$. Pelo critério de convergência dos residuais das variáveis não se obteve convergência para o valor configurado de 1×10^{-4} , a convergência foi realizada pelo critério de balanço de massa. O monitoramento da curva de temperatura na saída da câmara mostrava oscilações bastante consideráveis, o que ajudou a concluir que a chama do modelo RNG $k-\epsilon$ é instável.

Diferentemente do modelo RNG $k-\epsilon$, nas simulações dos modelos SST $k-\omega$ e *Realizable* $k-\epsilon$ não tiveram maiores problemas de convergência. Pode-se verificar nas Figuras 6.8 e 6.9 que a distribuição de temperaturas dentro da câmara de combustão é bem comportada e simétrica com relação ao eixo central.

Figura 6.8- Contornos de temperatura para a simulação do modelo SST k- ω , (a) plano de corte frontal, (b) na região da chama e (c) na saída da câmara de combustão.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Adicionalmente, os contornos de temperatura permitem observar as temperaturas de chama de cada um dos modelos testados, no modelo RNG k- ϵ a temperatura alcança aproximadamente os 2320 K. Nos modelos SST k- ω e *Realizable* k- ϵ as temperaturas de chama alcançaram valores próximos de 2250 K e 2270 K, respectivamente. Uma outra observação que se pode fazer a partir dos resultados dos contornos de temperatura, é o rápido aquecimento do ar de transporte quando se mistura com o ar primário na saída do tubo de biomassa, considerando que o ar de transporte entra na câmara à uma temperatura de 250 °C e o ar primário entra a 550 °C.

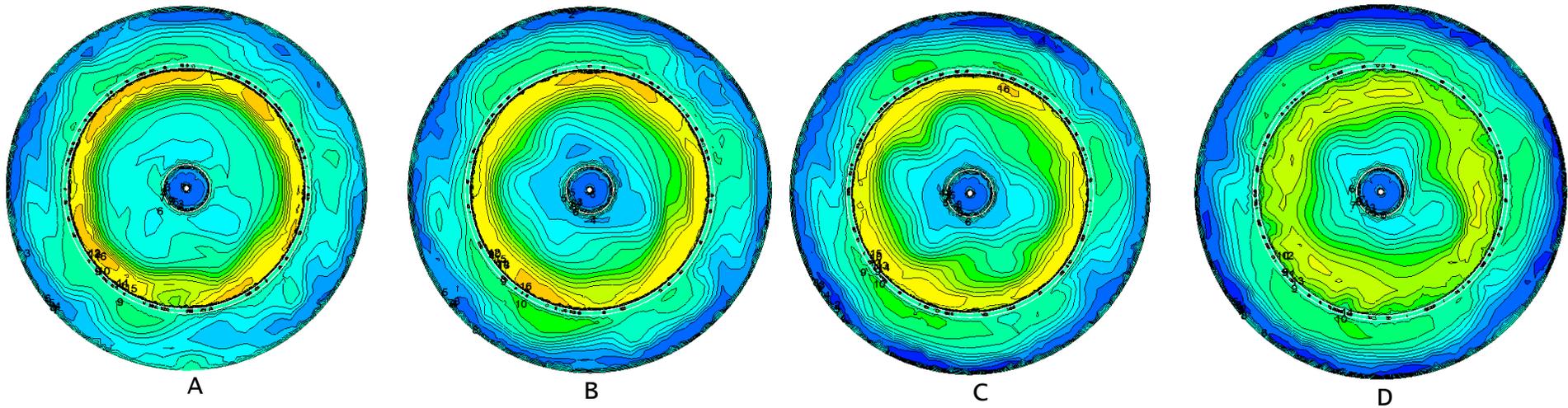
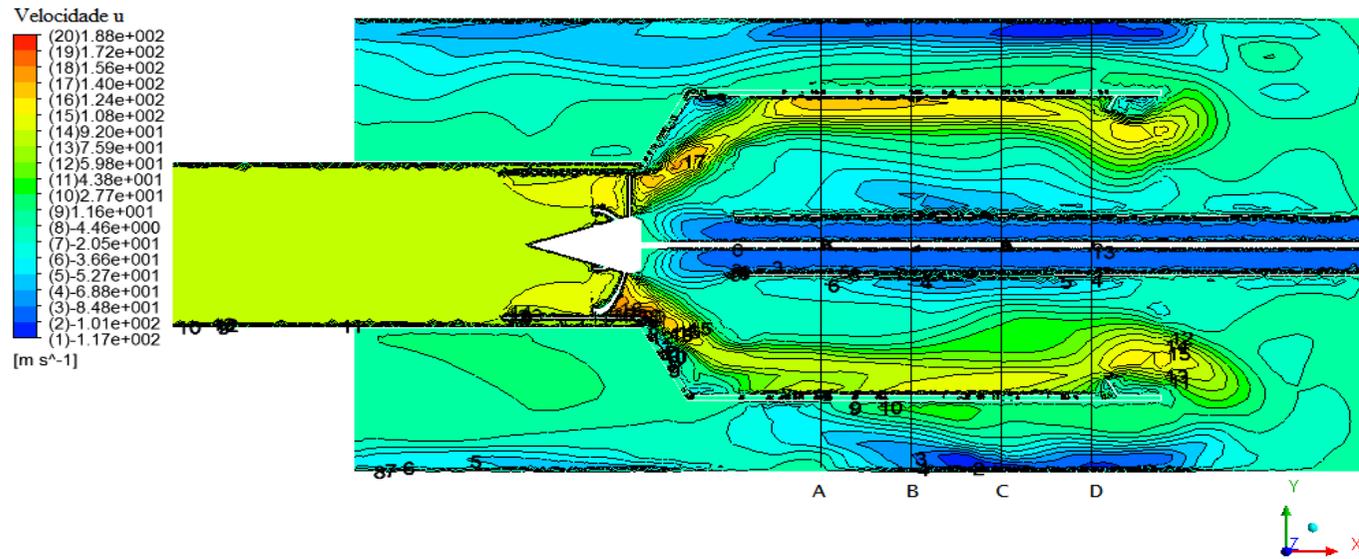
velocidade axial para as simulações reativas com os modelos RNG k- ϵ , SST k- ω e *Realizable* k- ϵ , respectivamente.

Inicialmente, realizou-se uma análise da fluidodinâmica da câmara de combustão com base nas observações das zonas de recirculação formadas pelo escoamento do ar, e concluiu-se parcialmente que a câmara poderia ancorar a chama dentro do combustor pelos resultados registrados com os modelos de turbulência RMS e RNG k- ϵ . No entanto, para que exista formação da chama além de velocidades na faixa certa precisam de gases combustíveis e calor presentes na região para sustentar a chama. Isso significa que a devolatilização deve acontecer em regiões próximas à região da zona de recirculação ou o escoamento reverso aproximá-los da região. Quando há velocidades elevadas na região de recirculação, o escoamento pode arrastar ou afastar os gases voláteis para longe da zona de recirculação principal, e se tais gases voláteis encontrarem uma fonte de calor próxima podem formar uma chama em outro ponto da câmara de combustão. Provavelmente, esse fato aconteceu nas simulações com os modelos SST k- ω e *Realizable* k- ϵ que formaram a chama na saída do combustor e na parte posterior da câmara, respectivamente.

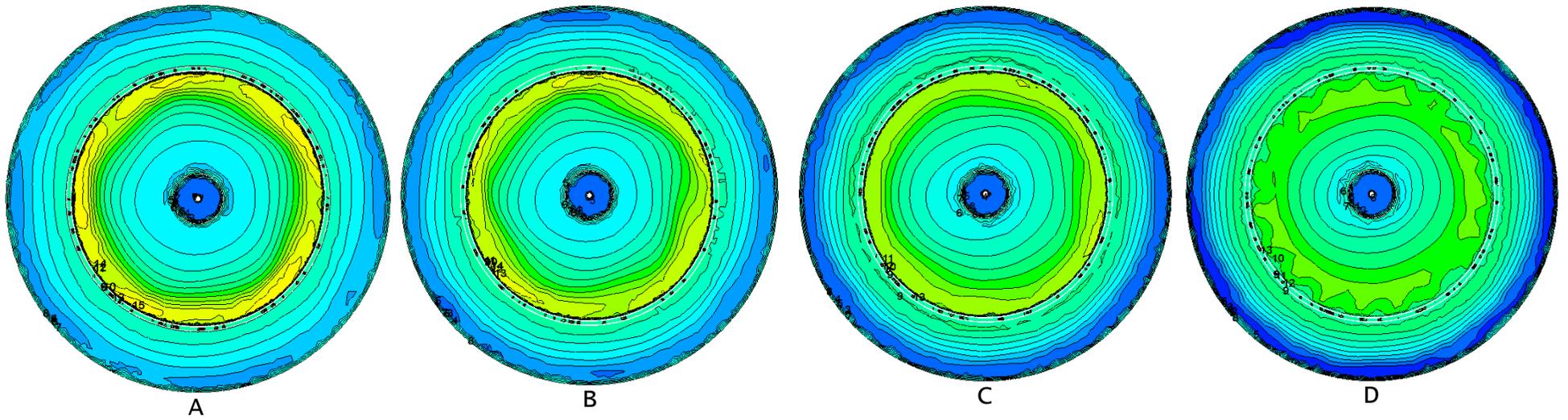
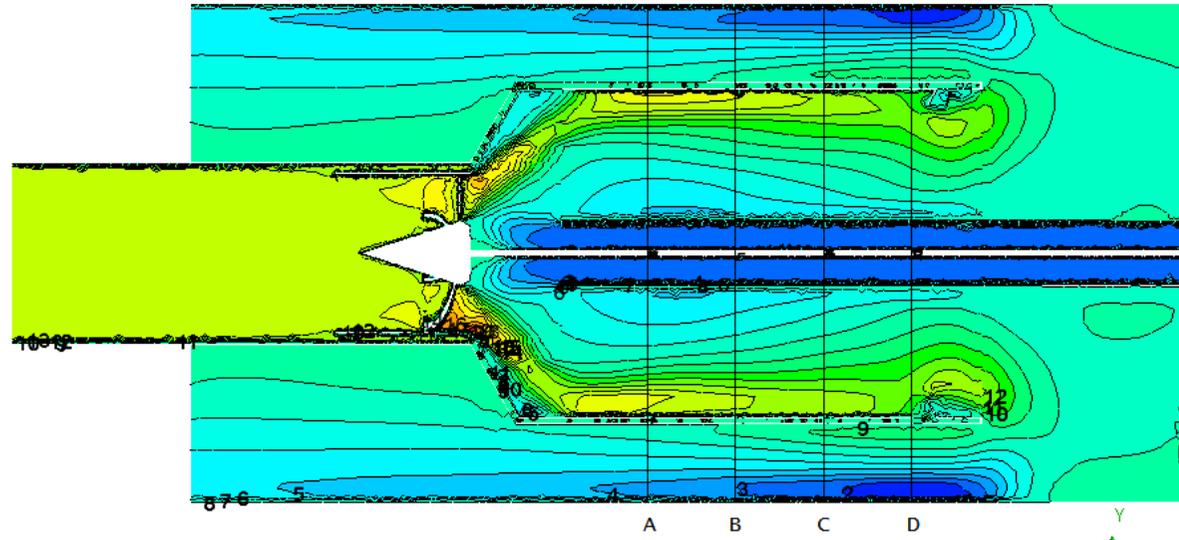
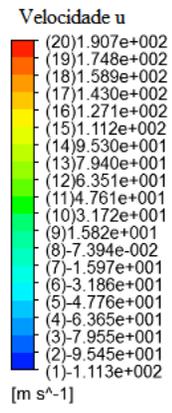
Com relação às velocidades axiais nas simulações reativas, nas Figuras 6.10 observa-se os efeitos provocados pelas reações de combustão e elevadas temperaturas na velocidade axial. Foi mencionado que um sistema em combustão afeta o campo de escoamento acelerando a velocidade média axial, diminuindo a massa específica, e conseqüentemente expandindo o gás. Nas simulações do modelo RNG k- ϵ os perfis de velocidade axial estão marcados pelo formato da chama. Nota-se que as velocidades axiais nas proximidades da chama são elevadas comparadas com os valores registrados nas simulações não reativas. Os valores das velocidades axiais aproximados são de -69 m/s a -20 m/s nas áreas aonde se formou a chama, e o perfil irregular da chama pode ser devido às velocidades elevadas que o contornam. Observa-se também perfis de velocidade muito irregulares na saída do combustor e na maioria das regiões perto da saída da câmara.

Em contrapartida, os perfis de velocidade axial registrados pelos modelos SST k- ω e *Realizable* k- ϵ não mostram diferenças significativas com relação aos perfis de velocidade não reativas, nem mesmo perto da região da formação das chamas. Observa-se velocidades elevadas nas regiões posterior as chamas.

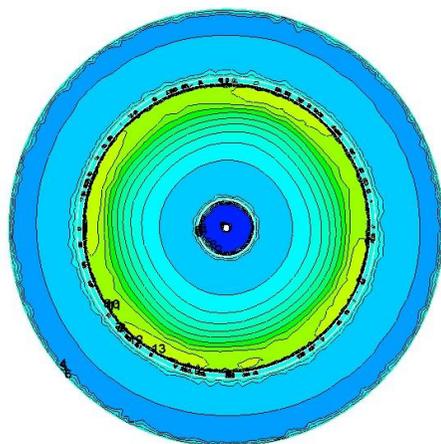
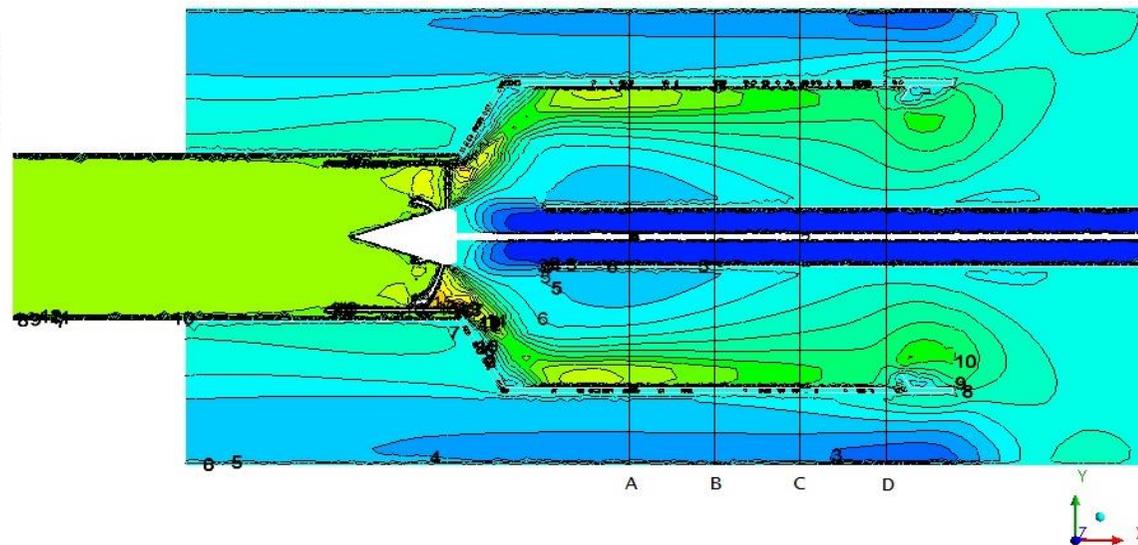
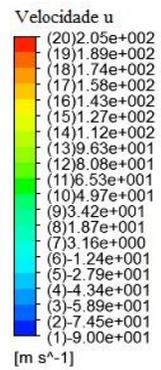
Figura 6.10- Contornos de velocidade axial nas simulações reativas, (a) RNG k- ϵ , (b) SST k- ω , (c) *Realizable* k- ϵ



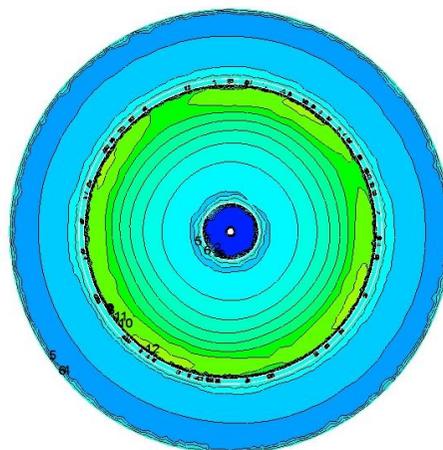
(a) RNG k- ϵ



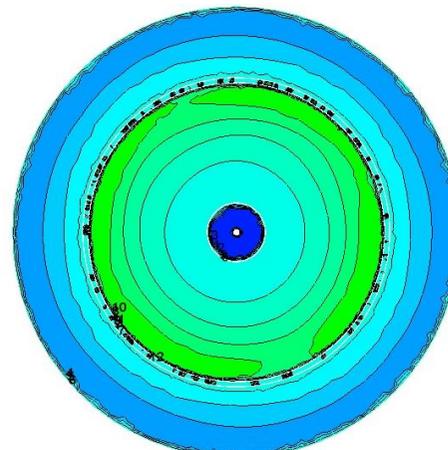
(b) SST k- ω



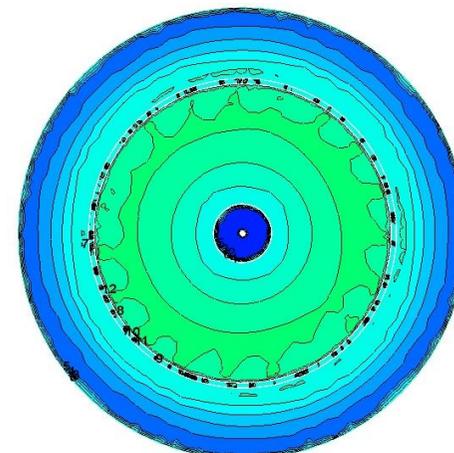
A



B



C



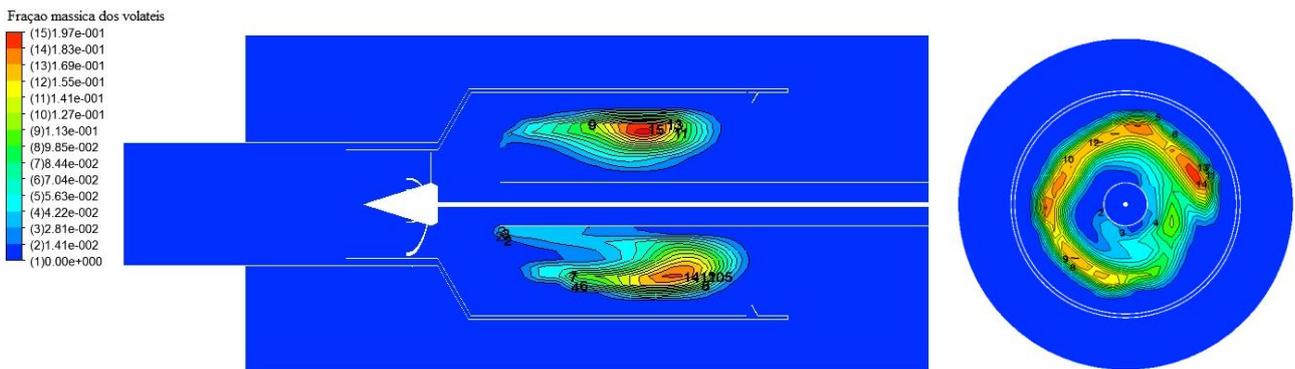
D

(c) *Realizable k-ε*

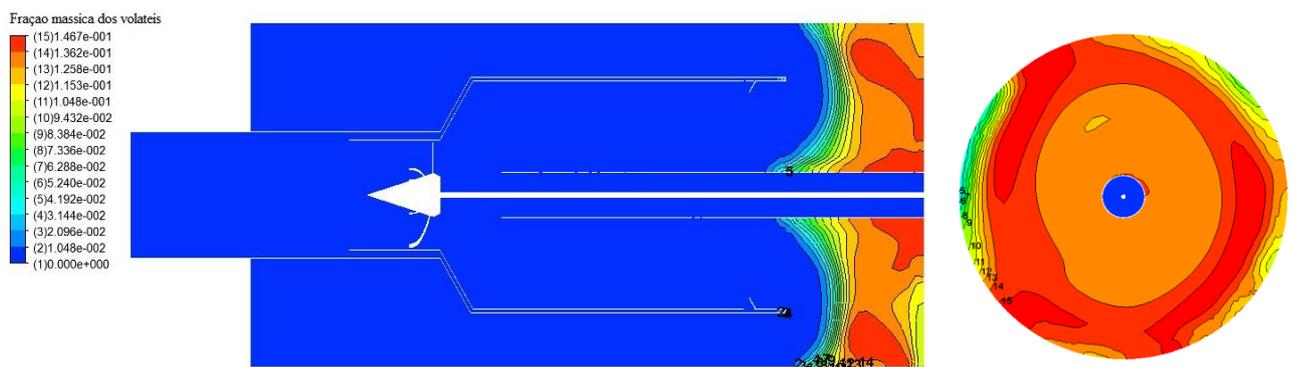
Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A formação da chama deve acontecer próximo do lugar em que a devolatilização acontece, porque os gases combustíveis liberados durante a devolatilização sustentam a chama. A Figura 6.11 mostra contornos da concentração de voláteis dentro da câmara, o que indica a região de maior devolatilização em cada um dos modelos de turbulência testados. No modelo RNG $k-\epsilon$ mostra-se uma região grande de concentração de voláteis dentro do combustor onde a chama se formou, como pode-se evidenciar nas Figuras 6.11 (a). No modelo SST $k-\omega$ a devolatilização acontece fora do combustor, exatamente na parte posterior da câmara como se observa na Figura 6.11 (b). A chama formou-se na parte anterior desta região. Entretanto, na simulação do modelo *Realizable* $k-\epsilon$ foi visualizado pequenos contornos de voláteis na Figura 6.11 (c), provavelmente a concentração de voláteis tem frações mássicas muito pequenas.

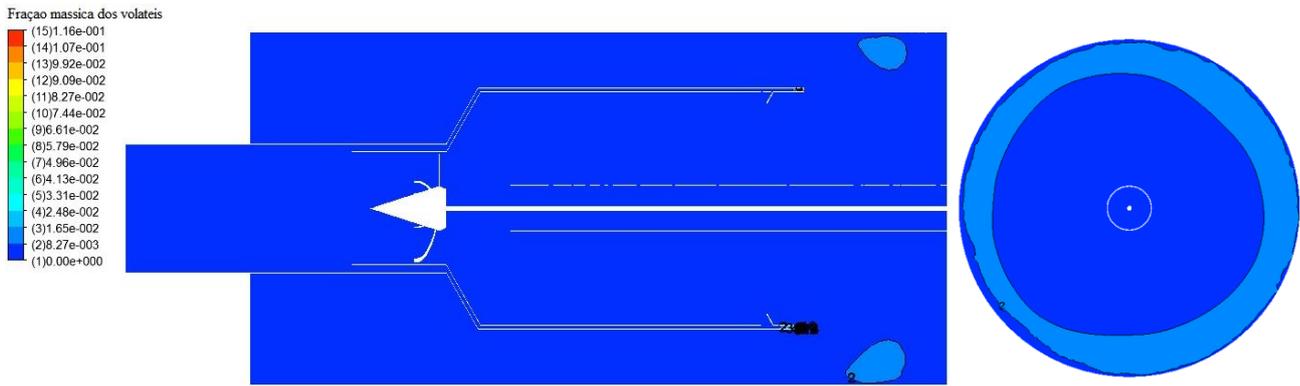
Figura 6.11- Contornos de fração mássica dos voláteis nos modelos simulados (a) RNG $k-\epsilon$, (b) SST $k-\omega$ e (c) *Realizable* $k-\epsilon$.



(a) RNG $k-\epsilon$



(b) SST $k-\omega$



(c) *Realizable* k- ϵ

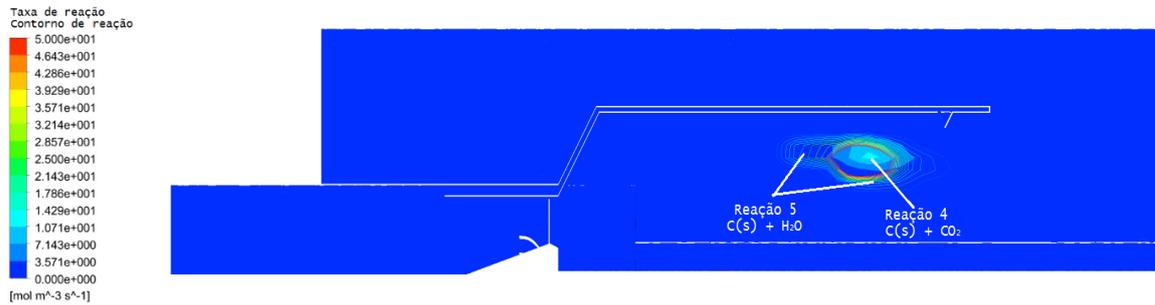
Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

O fato das frações mássicas dos voláteis se concentrarem em diferentes regiões fora do combustor nos modelos SST k- ω e *Realizable* k- ϵ pode estar ligado a diferentes fatores como a temperatura, tempo de devolatilização ou velocidade. Se a temperatura e o tempo não foram suficientes para que a devolatilização aconteça dentro do combustor, ela aconteceria fora. A devolatilização pode acontecer dentro do combustor, mas as velocidades elevadas arrastariam as espécies voláteis para fora do combustor. Certamente, essas suposições podem ser analisadas mais adiante quando for mostrado as condições das partículas de bagaço nestas regiões.

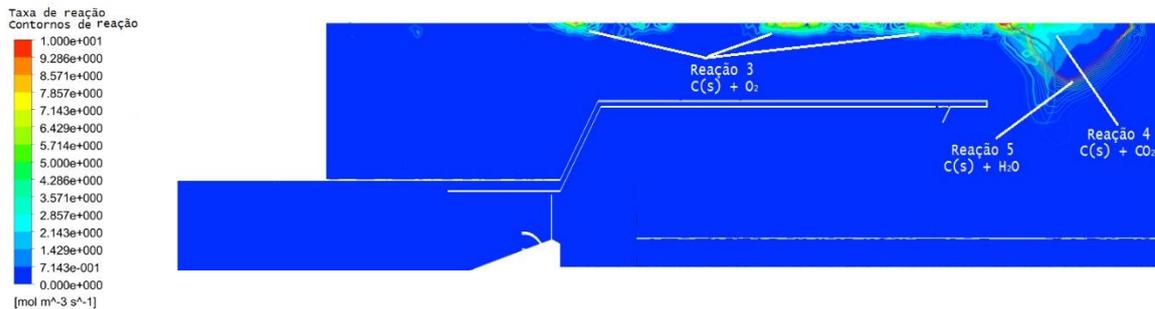
Com relação às reações heterogêneas entre o *char* e a concentração de algumas espécies como vapor de água H₂O, CO₂ e O₂. A Figura 12 mostra as regiões onde acontecem estas reações, mais especificamente mostram os contornos das taxas de reação das reações heterogêneas. Simulações usando o modelo RNG k- ϵ mostrou que a reação 4 e reação 5 (numeradas assim durante as configurações realizadas em ANSYS FLUENT) correspondem as reações de gaseificação entre C(s)+CO₂ e C(s)+H₂O respectivamente, e acontecem na região mais quente da chama, pouco mais deslocada para a saída do combustor. A reação 3 corresponde à oxidação do *char* C(s)+O₂ e a taxa de reação foi pequena.

Nas simulações com o modelo SST k- ω as reações heterogêneas 4 e 5 acontecem na região de alta temperatura da chama, já a reação 3 que corresponde à oxidação do *char* acontece por último em regiões a jusante da chama para completar a combustão das partículas de bagaço. Por sua vez, nas simulações com o modelo *Realizable* k- ϵ as reações 4 e 5 também acontecem na região mais quente da chama e a reação de oxidação por último, após a gaseificação da partícula.

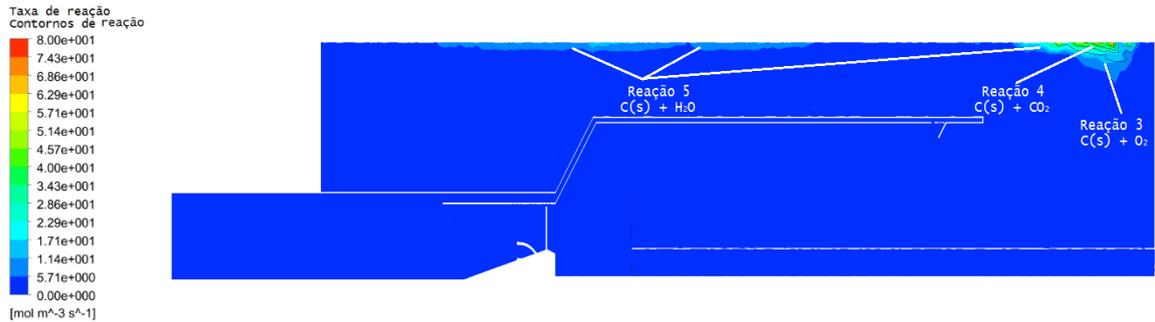
Figura 6.12- Contornos de taxas de reação das reações heterogêneas nas simulações dos modelos (a) RNG k-ε, (b) SST k-ω e (c) *Realizable* k-ε.



(a) RNG k-ε



(b) SST k-ω



(c) *Realizable* k-ε

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A análise das simulações reativas da câmara de combustão inclui a análise do histórico das partículas de biomassa. O modelo de partículas discretas DPM de ANSYS FLUENT tem a capacidade de rastrear cada uma das partículas combustíveis que entram na câmara, e permite obter informações de muitas variáveis e propriedades relacionadas à elas quando se configura, por exemplo, um plano, interface ou saída como ponto de medição ou extração de dados. Porém, é difícil realizar esta extração de dados quando se faz a simulação FLUENT em paralelo, pois as partículas estão localizadas em diferentes nós de computo. Portanto, para poder acessar a informação de cada uma das partículas no domínio é necessário armazenar a informação das propriedades das partículas em cada iteração como

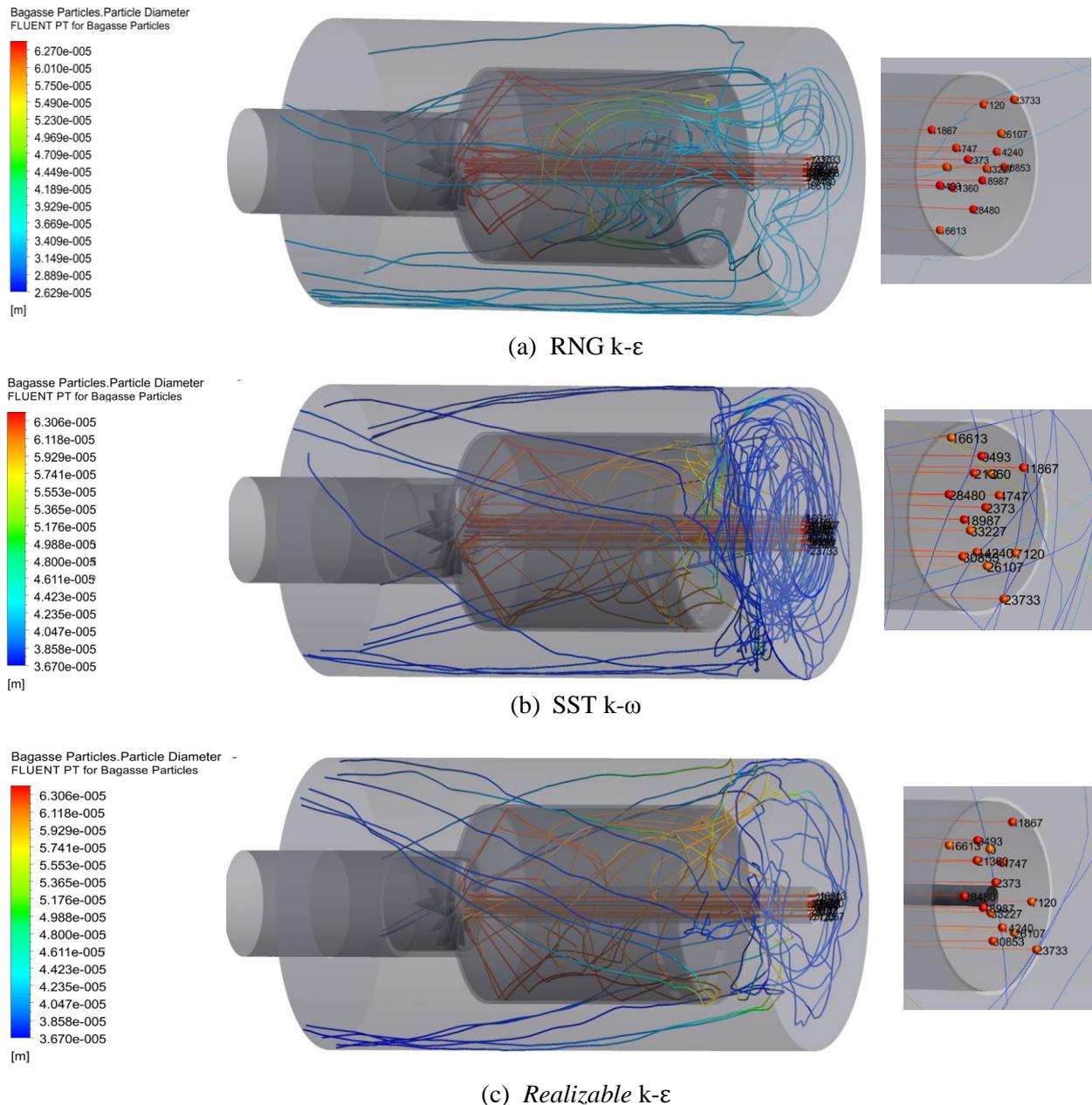
escalares definidas pelo usuário. Desta forma, foram utilizadas UDFs para poder armazenar as informações relacionadas às propriedades das partículas, e posteriormente fazer a exportação de arquivos que podem ser abertos com programas de cálculo como Excel. As UDFs programadas correspondem às macros DEFINE_DPM_SCALAR_UPDATE para atualização dos dados das partículas em cada iteração e o armazenamento da informação, e a macro DEFINE_DPM_OUTPUT para escrever a informação das partículas em arquivos.

As Figuras 6.13 mostram as trajetórias das partículas coloridas pelo histórico do diâmetro ao longo da câmara ciclônica. Pode-se verificar que as partículas entram na câmara com diâmetro médio de 63 μm e vão diminuindo com a perda de massa da partícula até alcançar o diâmetro aproximado de 26 μm na saída para as simulações com o modelo RNG k- ϵ , e até 36 μm para o modelo SST k- ω e *Realizable* k- ϵ . Nas simulações realizadas com o modelo RNG k- ϵ observa-se pelas trajetórias que as partículas recirculam mais dentro do combustor que as partículas registradas nos modelos SST k- ω e *Realizable* k- ϵ . A Figura 6.13 (a) mostra as partículas coloridas de azul claro quando abandonam o combustor, o que indica que o diâmetro diminuiu até aproximadamente 36 μm . Esta redução no diâmetro indica que a partícula perdeu massa quase até completar a queima total.

Contrariamente, a Figura 6.13 (b) mostra que as partículas não recirculam dentro do combustor e seguem a trajetória do fluido. Coloridas de laranja e amarelo quando abandonam o combustor, as partículas indicariam diâmetros em torno dos 58 μm . Essa pequena redução no diâmetro indica que as partículas perdem pouca massa dentro do combustor. Observa-se que existe uma grande recirculação das partículas na parte posterior da câmara ciclônica e a coloração do diâmetro das partículas indicam que perderam toda a massa nessa região. Isto, pode ser respaldado pela Figura 6.11 (b) que mostrou uma grande concentração de voláteis nessa região e também coincide com a zona de formação da chama.

De forma similar, a Figura 6.13 (c) mostra que as partículas recirculam pouco na região do combustor e a coloração dos diâmetros indicam tamanhos em torno dos 55 μm . Portanto, a perda de massa foi pouco dentro combustor e maior na região posterior da câmara ciclônica.

Figura 6.13- Trajetória das partículas de bagaço nas simulações com os modelos (a) RNG k- ϵ , (b) SST k- ω , (c) *Realizable* k- ϵ .



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Nas Figuras 6.13 mostram-se unicamente o rastreamento de 15 partículas do total de partículas injetadas, e mostra em detalhe (na parte posterior) o identificador ID de cada uma das partículas na entrada do tubo de biomassa o que permitirá acessar as informações de cada uma delas. As 15 partículas escolhidas aleatoriamente têm o mesmo identificador, ou seja, são as mesmas partículas para os três modelos de turbulência diferentes simulados para poder comparar os dados.

Foi mencionado anteriormente que é necessário configurar planos, interfaces ou saídas para a extração de dados, portanto por conveniência escolheu-se três planos que são: na saída do tubo de biomassa, na saída do combustor e na saída da câmara de combustão. Esses planos foram escolhidos estrategicamente, porque desejava-se conhecer informações precisas nesses pontos, por exemplo, na saída do tubo de biomassa tinha-se interesse em conhecer se a umidade contida na partícula tinha evaporado por completo, e a temperatura alcançada pela partícula, inicialmente espera-se que neste ponto a partícula começasse a desvolatilizar. Na saída do combustor tem interesse em conhecer a porcentagem de queima (*burnout*) experimentada pelas partículas, o diâmetro e a massa perdida. Já na saída da câmara de combustão o interesse principal é na temperatura das partículas, massa final da partícula e o tempo de residência. Logo, os parâmetros e propriedades de interesse das partículas obtidos nestes planos são informados na Tabela 6.1 para as 15 partículas representativas selecionadas. Esta Tabela 6.1 informa unicamente os dados extraídos da simulação do modelo RNG k-ε. Para as simulações dos modelos SST k-ω e *Realizable* k-ε os dados são informados nas tabelas B.1 e B.2 do Anexo B deste texto.

Os parâmetros *Alpha*, *Alpha char* e *Burnout* informados na Tabela 6.1 são referidos a fração de voláteis perdido, fração de *char* consumido e porcentagem de queima experimentada pela partícula, respectivamente. Estes parâmetros foram calculados com as Eqs. (6.1) a (6.3), da seguinte forma:

$$Alpha = \frac{m_{p,0} * (1 - f_{w,0}) - m_p}{m_{p,0} * f_{v,0}} \quad (6.1)$$

$$Alpha_char = \frac{m_{p,0} * (f_{a,0} + f_{c,0}) - m_p}{m_{p,0} * f_{c,0}} \quad (6.2)$$

$$Burnout = \frac{(1 - f_{a,0} / f_a)}{(1 - f_{c,0})} \quad (6.3)$$

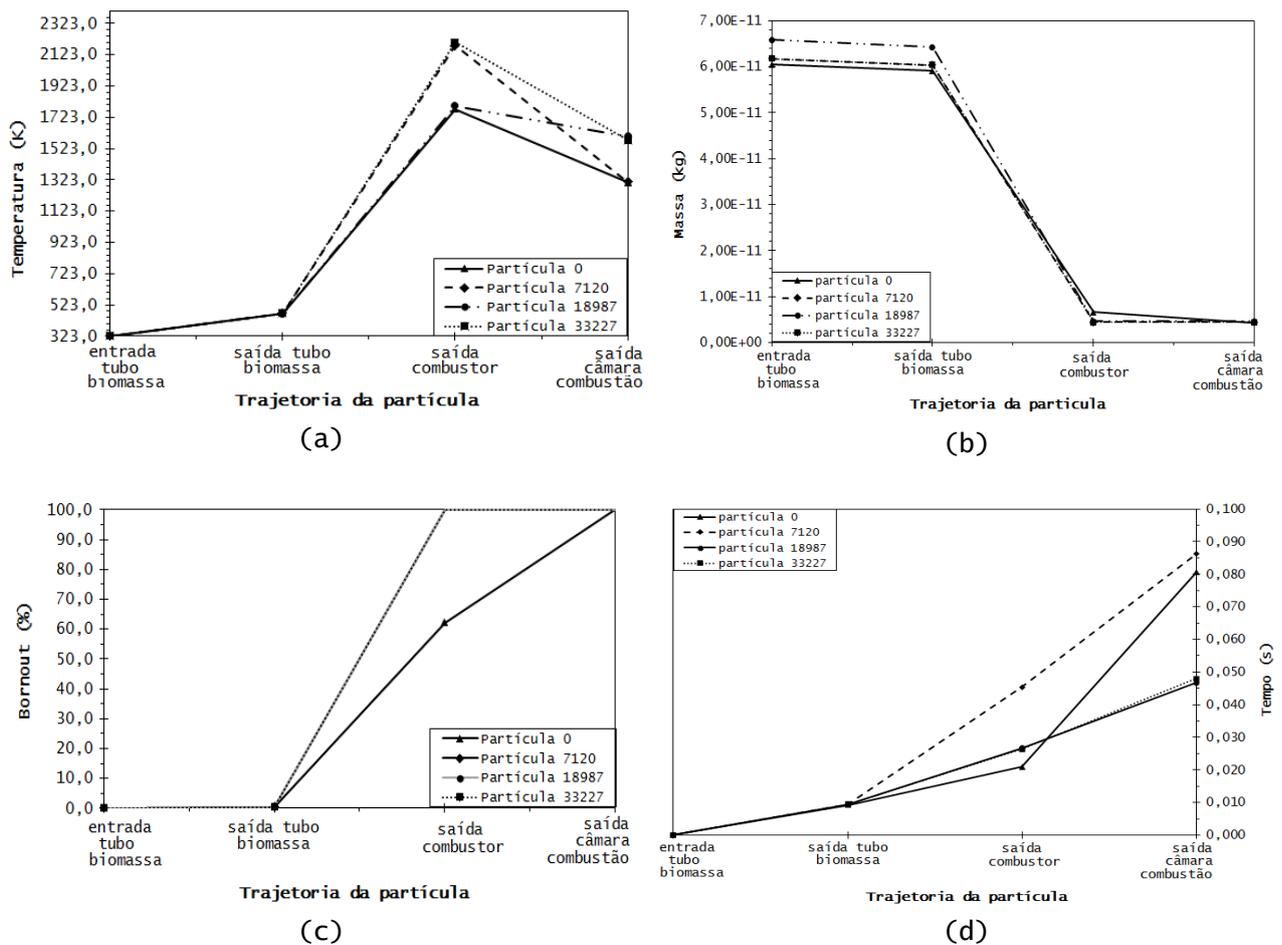
Tabela 6.1- Propriedades e parâmetros coletados de partículas para o modelo RNG k-ε.

Região Da Câmara	Partícula ID	Diâmetro inicial [m]	Massa [kg]	Diâmetro [m]	Temperatura [K]	Tempo [s]	Alpha	Alpha char	Fração mássica H ₂ O	Fração mássica cinzas	Burnout [%]
Saída tubo de biomassa	0	6,20E-05	5,90E-11	6,20E-05	469,639	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	2373	6,36E-05	6,36E-11	6,36E-05	472,418	0,010	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	4747	6,29E-05	6,16E-11	6,29E-05	468,084	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	7120	6,24E-05	6,03E-11	6,24E-05	469,886	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	9493	6,40E-05	6,49E-11	6,40E-05	467,087	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	11867	6,33E-05	6,29E-11	6,33E-05	472,287	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	14240	6,29E-05	6,16E-11	6,29E-05	468,292	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	16613	6,22E-05	5,97E-11	6,17E-05	483,464	0,010	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	18987	6,38E-05	6,43E-11	6,33E-05	468,651	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	21360	6,33E-05	6,29E-11	6,33E-05	466,932	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	23733	6,27E-05	6,10E-11	6,27E-05	473,817	0,010	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	26107	6,20E-05	5,90E-11	6,15E-05	469,353	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	28480	6,38E-05	6,43E-11	6,33E-05	466,670	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
	30853	6,31E-05	6,23E-11	6,31E-05	468,117	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374
33227	6,24E-05	6,03E-11	6,24E-05	471,569	0,009	0,000	0,000	0,000	0,072	0,374	
Saída combustor	0	6,20E-05	6,61E-12	3,54E-05	1775,490	0,021	1,00	0,36	0,000	0,647	62,1
	2373	6,36E-05	4,61E-12	3,26E-05	1826,690	0,084	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	4747	6,29E-05	2,37E-11	4,74E-05	1134,270	0,024	0,71	0,00	0,000	0,189	12,9
	7120	6,24E-05	4,37E-12	3,21E-05	2181,240	0,045	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	9493	6,40E-05	4,71E-12	3,28E-05	1824,680	0,023	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	11867	6,33E-05	4,56E-12	3,26E-05	1957,050	0,024	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	14240	6,29E-05	4,46E-12	3,23E-05	1718,030	0,023	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	16613	6,22E-05	4,32E-12	3,20E-05	2108,050	0,022	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	18987	6,38E-05	4,66E-12	3,28E-05	1797,200	0,027	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	21360	6,33E-05	4,56E-12	3,25E-05	2008,440	0,025	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	23733	6,27E-05	7,07E-12	3,61E-05	1494,910	0,020	1,00	0,30	0,000	0,625	59,7
	26107	6,20E-05	4,28E-12	3,18E-05	2035,620	0,026	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	28480	6,38E-05	4,66E-12	3,27E-05	2058,490	0,077	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	30853	6,31E-05	5,52E-12	3,40E-05	1838,770	0,021	1,00	0,74	0,000	0,818	80,5
33227	6,24E-05	4,37E-12	3,22E-05	2182,910	0,025	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0	
33227	6,24E-05	4,37E-12	3,22E-05	1953,470	0,029	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0	
33227	6,24E-05	4,37E-12	3,22E-05	2204,590	0,026	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0	
Saída câmara de combustão	0	6,20E-05	4,28E-12	3,18E-05	1305,580	0,081	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	2373	6,36E-05	4,61E-12	3,26E-05	1276,400	0,120	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	4747	6,29E-05	4,46E-12	3,22E-05	1294,540	0,069	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	7120	6,24E-05	4,37E-12	3,21E-05	1309,870	0,086	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	9493	6,40E-05	4,71E-12	3,28E-05	1633,920	0,041	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	11867	6,33E-05	4,56E-12	3,26E-05	1362,000	0,046	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	14240	6,29E-05	4,46E-12	3,23E-05	1363,080	0,043	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	16613	6,22E-05	4,32E-12	3,20E-05	1588,090	0,043	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	18987	6,38E-05	4,66E-12	3,28E-05	1600,660	0,047	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	21360	6,33E-05	4,56E-12	3,25E-05	1378,620	0,044	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	23733	6,27E-05	4,42E-12	3,22E-05	1259,390	0,067	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	26107	6,20E-05	4,28E-12	3,18E-05	1396,620	0,046	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	28480	6,38E-05	4,66E-12	3,27E-05	1388,880	0,102	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
	30853	6,31E-05	4,51E-12	3,24E-05	1174,610	0,113	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0
33227	6,24E-05	4,37E-12	3,22E-05	1577,110	0,048	1,00	1,00	0,000	1,000	100,0	

Fonte: Elaborado pelo próprio autor

O comportamento de alguns dos parâmetros de combustão informados na Tabela 6.1 são mostrados em forma de curvas na Figura 6.14 para os resultados do modelo RNG k- ϵ , Figuras 6.15 para o modelo SST k- ω e Figura 6.16 para o modelo *Realizable* k- ϵ . Por conveniência, para uma melhor visualização, é mostrado unicamente as curvas de quatro partículas escolhidas aleatoriamente (identificadas com seu número ID nas Figuras 6.10). Assim, a Figura 6.14 (a) mostra a temperatura das quatro partículas em função da trajetória delas, ou seja, a temperatura na entrada do tubo de biomassa, na saída do tubo de biomassa, na saída do combustor e na saída da câmara de combustão. A Figura 6.14 (b) mostra o histórico do diâmetro ao longo da sua trajetória, a Figura 6.14 (c) a porcentagem de queima ou *burnout* e a Figura 6.14 (d) mostra a massa e o tempo de residência das partículas em função da trajetória.

Figura 6.14- Parâmetros de combustão das partículas obtidos com o modelo RNG k- ϵ , (a) temperatura, (b) massa, (c) burnout, (d) tempo de residência.



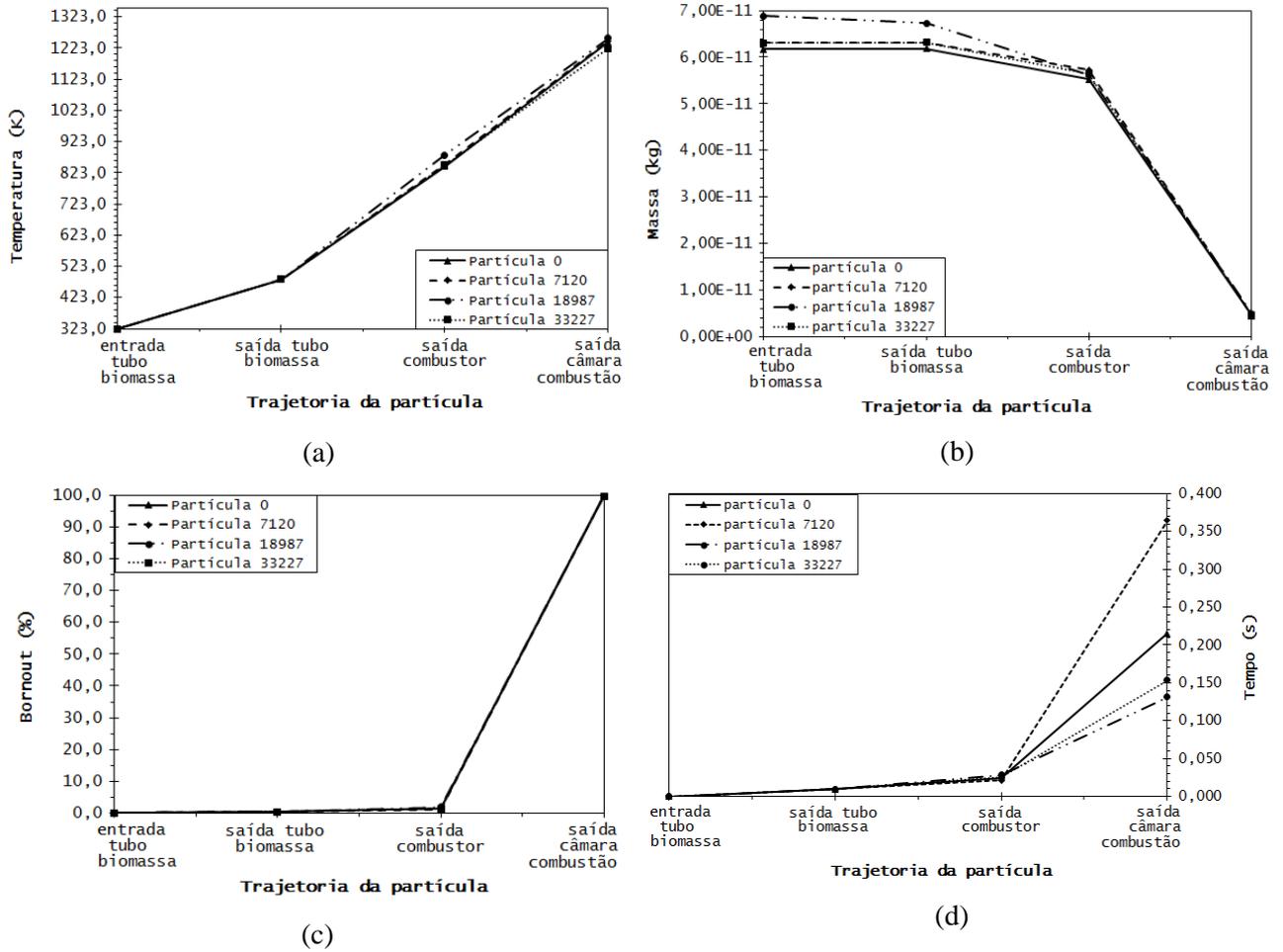
Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Observa-se na Figura 6.14 (a) o aumento da temperatura das partículas de bagaço desde o momento que começa seu trajeto pelo tubo de biomassa. Na saída do tubo de biomassa a temperatura alcançada pelas partículas é aproximadamente 470 K, o qual corresponde a uma temperatura abaixo da temperatura de devolatilização, considerando que foi configurado uma temperatura de 486 K como a temperatura de vaporização das partículas de bagaço na Tabela 4.4 e mostrado também na curva TG e DTG do bagaço na Figura 4.1 do Capítulo 4 deste texto. Desta forma, na saída do tubo de biomassa as partículas basicamente estão prontas a desvolatilizar. Após a saída do tubo de biomassa, nota-se um aumento de temperatura muito rápida devido à presença da chama dentro do combustor, o que permite uma rápida devolatilização e combustão do *char*, isto pode ser verificado também na Figura 6.14 (c) que mostra a queima completa das partículas de bagaço dentro do combustor. Na última parte do trajeto da partícula dentro da câmara de combustão, verifica-se uma diminuição na sua temperatura pela condição do fluido e o resfriamento inerte experimentado por se tratar basicamente de cinzas.

Com relação à massa da partícula, a Figura 6.14 (b) mostra que durante o aquecimento e a secagem dentro do tubo de biomassa ela permanece quase constante e durante a devolatilização e combustão do *char* a massa perde mais do 90% do seu valor inicial. A Figura 6.14 (d) mostra o tempo de residência das partículas dentro da câmara de combustão. Nota-se que algumas das partículas permanecem mais tempo dentro da câmara de combustão, em razão da maior recirculação experimentada pelas partículas como pode ser verificada também na figura da trajetória das partículas, Figura 6.13 (a).

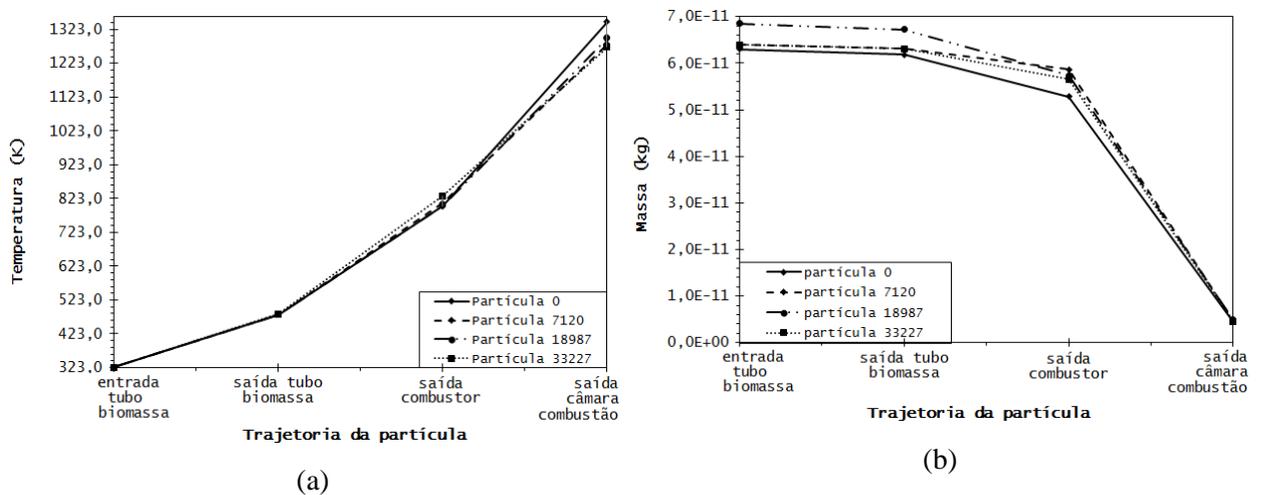
As Figuras 6.15 mostram as curvas dos parâmetros de combustão mencionados para as partículas do modelo SST $k-\omega$, e as Figuras 6.16 mostram as curvas dos parâmetros de interesse para as partículas do modelo *Realizable* $k-\epsilon$. As diferenças nos perfis das curvas de temperatura, massa e *burnout* com relação ao modelo RNG $k-\epsilon$ ocorrem por conta da formação da chama fora do combustor nestes dois modelos de turbulência, o que resulta no atraso dos estágios do processo de combustão.

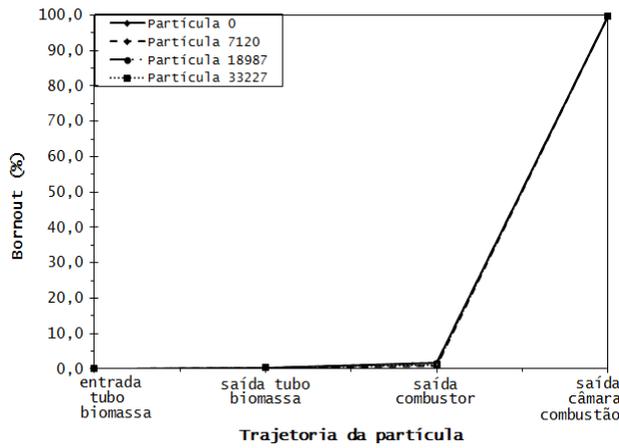
Figura 6.15- Parâmetros de combustão das partículas obtidos com o modelo SST k- ω , (a) temperatura, (b) massa, (c) burnout, (d) tempo de residência.



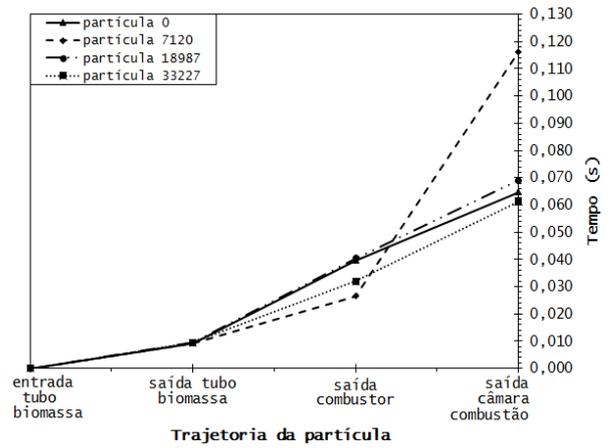
Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Figura 6.16- Parâmetros de combustão das partículas obtidos com o modelo *Realizable* k- ϵ , (a) temperatura, (b) massa, (c) burnout, (d) tempo de residência.





(c)



(d)

Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Dessa forma, foram mostrados e discutidos os resultados das simulações não reativa e reativa da combustão de partículas de bagaço na câmara de combustão. Os resultados obtidos mostram detalhes de interesse da fluidodinâmica da câmara e também da combustão das partículas usando o modelo DPM ou modelo de fase discreta de ANSYS FLUENT.

Capítulo 7

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A partir de um projeto previamente iniciado pela empresa Brayton Energy e o grupo de pesquisa GETEC, foi estudado o modelo reduzido (1/4 de escala da real) de uma câmara de combustão ciclônica de um ciclo de turbina a gás com queima externa, projetado para gerar 900 kWe de energia elétrica a partir da queima de biomassa pulverizada, principalmente bagaço de cana-de-açúcar. O estudo da câmara de combustão foi iniciado com a elaboração da geometria e desenhos CAD a partir de esboços iniciais e fotografias.

Foi utilizada a dinâmica de fluidos computacional CFD para obter informação detalhada da fluidodinâmica da câmara de combustão, realizando simulações não reativas e utilizando diferentes modelos de turbulência indicados para escoamentos rotacionais. Os modelos de turbulência utilizados foram os modelos de Tensões de Reynolds RMS, RNG k- ϵ , SST k- ω e *Realizable* k- ϵ . Posteriormente, foi realizado simulações reativas utilizando-se como combustível partículas de bagaço de cana-de-açúcar, e utilizando o modelo de transporte de espécies para a combustão com o método *Finit Rate/Eddy Dissipation* para a iteração das reações químicas com a turbulência. O modelo de Fase Discreta DPM foi utilizado para o rastreamento das partículas combustíveis e o modelo de Ordenadas Discreta para a radiação. Foram configurados dados de cinética química e propriedades físicas do bagaço de cana-de-açúcar com a ajuda da ferramenta *Coal Calculator* de ANSYS FLUENT.

Os resultados das simulações não reativas permitem avaliar a fluidodinâmica da câmara de combustão ciclônica. Esta avaliação da fluidodinâmica inclui principalmente a distribuição de velocidades axiais e tangenciais dentro da câmara de combustão, e a identificação das zonas de recirculação características dos escoamentos rotacionais. Foram identificadas 4 zonas de recirculação dentro da câmara ciclônica, porém uma zona de

recirculação principal ocupa a maior parte da região central do combustor, sendo registrada de forma similar com leves variações em comprimento em todas as simulações realizadas utilizando os diferentes modelos de turbulência testados.

De forma geral, os perfis de velocidades axiais registradas em diferentes regiões do combustor mostram velocidades elevadas na corrente principal e velocidades médias nas zonas de recirculação e na saída do combustor. Simulações com dois modelos de turbulência testados indicam que as zonas de recirculação têm velocidades médias aceitáveis que podem permitir a formação da chama dentro do combustor. Portanto, desde o ponto de vista fluidodinâmico o projeto da câmara ciclônica se mostra adequado.

As simulações reativas mostram gráficos dos contornos de temperatura, perfil de velocidades axiais, concentrações de espécies, trajetória de partículas e curvas de alguns parâmetros importantes de combustão como a temperatura, massa, porcentagem de queima (*burnout*) e tempo de residências das partículas de bagaço de cana-de-açúcar. Os contornos de temperatura mostraram a formação da chama dentro do combustor em volta do tubo de biomassa registrado nas simulações com o modelo de turbulência RNG k- ϵ , embora a chama formada parece instável pelos gradientes de temperatura mostrados e pelo formato assimétrico da chama com relação ao eixo central. Portanto, a partir da avaliação reativa pode-se concluir que se precisaria estender levemente o comprimento do combustor para permitir a estabilidade da chama.

Diante disso, após esse estudo de simulação numérica computacional realizado pode-se concluir que o projeto da câmara de combustão ciclônica apresenta vantagens para a queima de combustíveis de biomassa particulados. O escoamento das partículas de biomassa pelo tubo de biomassa com direção contra-corrente à chama permite o aquecimento rápido do fluido transportador e as partículas. Verificou-se que a temperatura das partículas na saída do tubo de biomassa alcança aproximadamente os 470 K, na qual é uma temperatura acima da temperatura de vaporização da água e abaixo da temperatura de devolatilização, pelo que as partículas se encontram livres de água e prontas a desvolatilizar dentro do combustor. Por outro lado, os orifícios de resfriamento ajudaram na formação das zonas de recirculação ao injetar o ar de resfriamento com direção contrária ao escoamento do ar de combustão principal.

Finalmente, o modelo de fase discreta DPM de ANSYS FLUENT mostrou habilidades muito úteis para representar a trajetória de partículas, além de permitir acessar a

informação de propriedades e parâmetros de combustão das partículas utilizando planos ou interfaces como pontos de extração de informação.

7.1 Recomendações para trabalhos futuros

O estudo de simulação numérica utilizando dinâmica de fluidos computacional realizado da câmara de combustão ciclônica permitiu avaliar o projeto da câmara em uma estágio inicial, no entanto conclui-se que é necessário realizar alguns estudos complementares para ter uma avaliação mais completa da câmara estudada. A continuação se realiza uma lista das tarefas que poderiam ser realizadas para complementar este estudo.

1. Realizar as simulações reativas em CFD da câmara utilizando os modelos de turbulência RMS e o modelo LES para permitir analisar em mais detalhe a formação da chama, e confirmar que o projeto atual da câmara ciclônica permite ancorar a chama dentro do combustor da forma que o represento o modelo de turbulência RNG k- ϵ .
2. Mudar o ângulo de inclinação das palhetas curvas do *swirler* para dar ao escoamento um movimento rotacional maior, a fim de permitir que as partículas permaneçam por maior tempo dentro do combustor para garantir a devolatilização e formação da chama dentro combustor, e posteriormente realizar as simulações em CFD com esta nova configuração.
3. Realizar uma validação dos resultados simulados com dados experimentais para ter confiabilidade dos resultados obtidos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABOYADE, A. O; HUGO, J. T; CARRIER, M; MEYER, L. E; STAHL, R; KNOETZE, H. J; JOHANN, F. GÖRGENS, J. F. (2011). “Non-isothermal kinetic analysis of the devolatilization of corn cobs and sugar cane bagasse in an inert atmosphere”. *Thermochimica Acta*, vol. 517, pp. 81–89.
- AL-ATTAB, K.; ZAINAL, Z. A. (2015). “Externally fired gas turbine technology: A review”. *Applied Energy*, vol 138, pp. 474–87.
- ANSYS FLUENT. (2017). “ANSYS Fluent Theory Guide” (Release 17.0), ANSYS Inc. 850 p.
- ANSYS FLUENT. “ANSYS Fluent UDF Manual” (Release 15.0), ANSYS Inc. 592 p.
- ANSYS FLUENT. “ANSYS Fluent User's Guide” (Release 18.1), ANSYS Inc. 3028 p.
- ÁVILA, I.; CRNKOVIC, P. M.; LUNA, C. M. R.; MILIOLI, F. E. (2017). “Use of a fluidized bed combustor and thermogravimetric analyzer for the study of coal ignition temperature”. *Applied Thermal Engineering*, vol. 114, pp. 984–992.
- BADZIOCH, S; HAWKSLEY, P. G. W. (1970). “Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles”. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 9(4), pp. 521-530.
- BAFUWA, G. C; McCALLUM, N. R. L. (1973). “Flame stabilization in swirling jets”. In *Proceeding of the European Symposium of Combustion Institute*. pp 565-570.
- BARSALI, S; DE MARCO, A; GIGLIOLI, R; LUDOVICI, G; POSSENTI, A. (2015). “Dynamic modelling of biomass power plant using micro gas turbine”. *Renewable Energy*, vol. 80, pp. 806–818.
- BAZZO, E. (1995). “Geração de Vapor”. 2nd Edição. Editora da UFSC.
- BELTAGUI, S. A; McCALLUM, N. R. L. (1988). “Characteristics of enclosed swirl flames with peripheral fuel injection”, *J. Inst. Energy* vol. 61, pp. 3-16.
- BELTAGUI, S. A; McCALLUM, N. R. L. (1976). “Aerodynamics of vane-swirled flames in furnaces”, *J. Inst. Fuel* vol. 49, pp. 183-193.
- BENKOUSSAS, B; CONSALVI, J. L; PORTERIE, B; SARDOY, N; LORAUD, J. C. (2007). “Modelling thermal degradation of woody fuel particles”. *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 46(4), pp. 319-327.
- BOLHÀR-NORDENKAMPF, M. (2016). *Scale-Up in Combustion*. In *Handbook of Combustion* (eds M. Lackner, F. Winter and A.K. Agarwal). Doi:10.1002/9783527628148.hoc095

- CARNEIRO, A.; DE OLIVEIRA, D.; ROCHA, M.; SILVA, M.; GUERRA, D.; NOGUEIRA, M. (2017). “Performance quantification of a cyclonic boiler using biomass sawdust”. *Energy Procedia*, vol 120, pp. 403–409.
- CARVALHO, J. A; MENDIBURU, A. A; CORONADO, C. R; MCQUAY, M. Q. (2018). “Combustão aplicada”. Editora da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), 372 pp.
- CEN, K.; YAO, Q.; CAO, X.; ZHAO, X.; HUANG, Z.; ZHOU, J. (1997). “Theory and application of combustion, flow, heat transfer and gasification of coal slurry”. Hangzhou: Zhejiang University Press.
- CENTENO, G. F. O. “Avaliação da combustão de bagaço e palha de cana-de-açúcar numa fornalha de caldeira industrial AMD a partir da modelagem por CFD”. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Itajubá, Brasil, 2015, 239 p.
- CHEN, L; YONG, S. S; GHONIEM, A. F. (2012). “Oxy-fuel combustion of pulverized coal: Characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling”. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 38, pp. 156-214.
- CHEN, L. (2013). “Computational fluid dynamics simulations of oxy-coal combustion for carbon capture at atmospheric and elevated pressures”. Tese de doutorado, Mechanical Engineering, Massachusetts Institute of Technology. 239 p.
- CHEN, Z.; HU, M.; ZHU, X.; GUO, D.; LIU, S.; HU, Z.; XIAO, B.; WANG, J.; LAGHARI, M. (2015). “Characteristics and kinetic study on pyrolysis of five lignocellulosic biomass via thermogravimetric analysis”. *Bioresource technology*, vol. 192, pp. 441–50.
- COLLAZO, J; PORTEIRO, J; PATIÑO, D; GRANADA, E. (2012). “Numerical modeling of the combustion of densified wood under fixed-bed conditions”. *Fuel*, vol 93, pp. 149–159.
- CONAB, 2019. Disponível em: <<http://www.conab.gov.br/>>. Acessado em abril de 2019.
- DA SILVA, R. C. (2013). “Investigation of Pulverized, Pre-Dried Lignite Combustion under Oxy-Fired Conditions in a Large-Scale Laboratory Furnace”. Tese de doutorado. pp. 269.
- DALY, B. J; HARLOW, F. H. (1970). “Transport equations in turbulence”. *Physics of Fluids*, vol. 18, pp. 2634–2649.
- DE CAMPOS, T. N.; CAIXETA F. J. V. (2017). “Potencial e disponibilidade de biomassa de cana-de-açúcar na região Centro-Sul do Brasil: indicadores agroindustriais”. *RESR, Piracicaba – SP*, vol 55, nº 03, pp. 479–496.
- DE JONG, W.; VAN OMMEN, R. J. (2014). “Biomass as a sustainable energy source for the future: fundamentals of conversion processes”. Wiley & Sons Inc., Hoboken, New Jersey, 603 p.
- DE SOUZA, R. M.; MARQUES, L. C.; CASTELO, A. M.; DA SILVA GUERRA, D. R.; NOGUEIRA, M. F. M. (2010). “Escoamentos bi-fásico, sólido-ar, em combustores ciclônicos”. VII Escola de Primavera de Transição e Turbulencia. pp. 1-10.

- DI BLASI, C. (2008). “Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis”. *Progress Energy Combustion Science*, vol. 34, pp. 47–90.
- DINIZ FILHO, P. T; SILVEIRA, J. L; TUNA, C. E; LAMAS, W. DE Q. (2013). “Energetic, ecologic and fluid-dynamic analysis of a fluidized bed gasifier operating with sugar cane bagasse”. *Applied Thermal Engineering*, vol. 57 (1-2), pp.116–124.
- DRYDEN, I.G.C. (1982). “Chapter 6 - Solid-fuel firing”. In *The Efficient Use of Energy (Second Edition)* (Eds I.G.C. Dryden). Doi.org/10.1016/B978-0-408-01250-8.50015-5.
- DURANTE, A.; PENA-VERGARA, G.; CURTO-RISSO, P. L.; MEDINA, A.; CALVO HERNÁNDEZ, A. (2017). “Thermodynamic simulation of a multi-step externally fired gas turbine powered by biomass”. *Energy Conversion and Management*, vol 140, pp. 182–191.
- DUWIG, C.; FUCHS, L. (2006). “Study of precessing vortex core during vortex breakdown using les and pod”. Disponível em: <http://www.tsfp-conference.org/proceedings/2007/142-study-of-precessing-vortex-core.pdf>. Acessado em 26/08/2019.
- DUWIG, C.; FUCHS, L. (2007). “Large eddy simulation of vortex breakdown/flame interaction”. *Physics of Fluids*, 19(7), 075103. doi:10.1063/1.2749812.
- EIAMSA-ARD, S; WONGCHAREE, K; SRIPATTANAPIPAT, S. (2009). *Int. Commun. Heat .Mass Transfer*, vol. 36, pp. 947–955.
- EPE – EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. *Balanco Energético Nacional* (2018). Disponível em: <<https://www.ben.epe.gov.br>>. Acesso em setembro de 2019.
- ENGDAR, U; KLINGMANN, J. (2002). “Investigation of two-equation turbulence models applied to a confined axis-symmetric swirling flow”. *ASME Proceedings, Pressure Vessels and Piping Conference*, vol 2, pp. 199–206.
- ENGDAR, U; NILSSON, P; KLINGMANN, J. J. (2004). “Investigation of turbulence models applied to premixed combustion using a level-set flamelet library approach,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 126 (4), pp. 701–707.
- GELDART, D. (1973). “Types of gas fluidization”. *Powder Technology*, vol. 7, pp. 285-292.
- GIDDINGS, D. (2000). “Investigation into the operation of a cement works precalciner vessel”. *Tese de Doutorado, University of Nottingham*, 241 p.
- GLICKSMAN, L. R. (1984). “Scaling relationships for fluidized beds”. *Chemical Engineering Science*, Vol. 39 (9), pp. 1373–1379
- GÓMEZ, M. A; PORTEIRO, J; PATIÑO, D; MÍGUEZ, J. L. (2014). “CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion”. *Fuel*, vol. 117, pp. 716–732.

- GÓMEZ, M. A; PORTEIRO, J; PATIÑO, D; MÍGUEZ, J. L. (2015). “Eulerian CFD modelling for biomass combustion: Transient simulation of an underfeed pellet boiler”. *Energy Conversion and Management*, vol. 101, pp. 666–680.
- GOMEZ, E. O; CORTEZ, L. A. B; LORA, E. S; SANCHEZ, C. G; BAUEN, A. (1999). “Preliminary tests with a sugarcane bagasse fueled fluidized-bed air gasifer”. *Energy Conversion & Management*. vol. 40, pp. 205-214.
- GRØNLI, M. (1996). “A theoretical and experimental study of the thermal degradation of biomass”. Tese de Doutorado, The Norwegian University of Science and Technology, Norway, Report NTNU, 115 p.
- GUPTA, A. K; LILLEY, D. G; SYRED, N. (1984). “Swirl flows”. Tunbridge Wells, Kent: Abacus Press. 475 p.
- HAIDER, A; LEVENSPIEL, O. (1989). "Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles,". *Powder Technology*, vol. 58, pp. 63-70.
- HERMANSSON, S; THUNMAN, H. (2011). “CFD modelling of bed shrinkage and channelling in fixed-bed combustion”. *Combustion and Flame*, vol. 158, pp. 988–999.
- IKRAM, A.; ABD RAHMAN, A.; MOSTAFA, N. A.; SHAMSUDDIN, A. H. (2009). “Path Flow Study of a Lab Scale Cyclonic Combustor for Coal-Biomass Co-combustion”. *Proceedings of ICEE 2009 3rd International Conference on Energy and Environment*, 7-8 December 2009, Malacca, Malaysia. pp. 482-483.
- IONASHIRO, M. (2012). “Giolito: fundamentos da termogravimetria e análise térmica diferencial/calorimetria exploratória diferencial”. 2a. Ed. Araraquara: Vesper.
- JAMES, D. W. (2000). “Biomass combustion chamber for gas turbine”. WO 2000060225 A1.
- KANGWANPONGPAN. T. (2013). “Contribution to CFD modeling of Lignite oxy-fuel combustion with special focus on radiation properties”.
- KAUTZ, M.; HANSEN, U. (2007). “The externally-fired gas-turbine (EFGT–Cycle) for decentralized use of biomass”. *Applied Energy*, vol 84, pp. 795–805.
- KHATAMI, R; STIVERS, C; LEVENDIS, Y. (2012). “Ignition characteristics of single coal particles from three different ranks in O₂/N₂ and O₂/CO₂ atmospheres”. *Combustion and Flame*, vol. 159, pp. 3554–3568.
- KILIK, E. (1976). “The influence of swirler design parameters on the aerodynamics of the downstream recirculation region”. Tese de doutorado. Cranfield Institute of Technology. pp. 334.
- KLASS, D. L. (1998). Chapter 7 – Thermal Conversion: Combustion. In: *Biomass for Renewable Energy, Fuels, and Chemicals*. pp. 191–224.
- KLEINHANS, U; HALAMA, S; SPLIETHOFF, H. (2017). “The role of gasification reactions during pulverized solid fuel combustion: A detailed char combustion model

based on measurements of char structure and kinetics for coal and pre-treated biomass”. *Combustion and Flame*, vol. 184, pp. 117–135.

- KOBAYASHI, H; HOWARD, J. B; SAROFIM, A. F. (1977). “Coal devolatilization at high temperatures”. In 16th Symposium (International) on Combustion. The combustion institute: Pittsburgh.
- KOPS, S. M. B; MALTE, P. C. (2004). “Simulation and Modeling of Wood Dust Combustion in Cyclone Burners: Final Technical Report”. Prepared for the U. S. Department of Energy. pp 54. Disponível em: <http://faculty.washington.edu/malte/pubs/reports/WoodDust.pdf>.
- KUMAR, M; GHONIEM, A. F. (2012). Multiphysics Simulations of Entrained Flow Gasification. Part I: Validating the Nonreacting Flow Solver and the Particle Turbulent Dispersion Model. *Energy Fuels*, vol. 26 (1), pp. 451-463.
- KUPRIANOV, V. I; PERMCHART, W; JANVIJITSAKUL, K. (2005). “Fluidized bed combustion of pre-dried Thai bagasse”. *Fuel Processing Technology*, vol. 86 (8), pp. 849–860. Doi:10.1016/j.fuproc.2004.09.002.
- LEAP CFD TEAM. Tips & Tricks: “Convergence and mesh independence study”. Disponível no site: <<http://www.computationalfluidynamics.com.au/convergence-and-mesh-independent-study/>>. Último acesso novembro de 2019
- LEFEBVRE, A; BALLAL, D. (2010). “Gas Turbine Combustion”. Third Edition, CRC Press, 560 p.
- LIMA, R. C. R.; NOGUEIRA, M. F. M.; GUERRA, D. R. S. (2017). “CFD modeling of a small-scale cyclonic combustor chamber using biomass poder”. *Energy Procedia* vol. 120, pp. 556–563.
- LIU, T; BAI, F; ZHAO, Z; LIN, Y; DU, Q; PENG, Z. (2017) “Large eddy simulation analysis on confined swirling flows in a gas turbine swirl burner” *Energies*, 10, 2081. Doi:10.3390/en10122081.
- LUO, M.; STANMORE, B. (1992). “The combustion characteristics of char from pulverized bagasse”. *FUEL*, vol 71, pp. 1074–1076.
- LYRA, M. (2016). “Mercado de biomassa amplia operações no brasil e projeta crescimento a partir da geração com cana de açúcar”. Entrevista, Petronotícias. Disponível em <https://petronoticias.com.br/archives/80929>. Acessado em 18 de setembro de 2018.
- MA, J; ZITNEY, S. E. (2012). Computational Fluid Dynamic Modeling of Entrained-Flow Gasifiers with Improved Physical and Chemical Submodels. *Energy Fuels*, vol. 26 (12), pp. 7195- 7219.
- MAGNUSSEN, B. F; HJERTAGER, B. W. (1976). On mathematical modelling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In 16 Symposium (International) on Combustion, The combustion institute, Pittsburgh.

- MAHMOUDI, A. H; HOFFMANN, F; PETERS, B. (2014). “Application of XDEM as a novel approach to predict drying of a packed bed”. *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 75, pp. 65–75.
- MAHMOUDI, A. H. (2015). “Prediction of heat-up, drying and gasification of fixed and moving beds by the discrete particle method (dpm)”. *Teses de doutorado. Faculdade de Ciências Tecnologia e Comunicação. Universidade de Luxemburgo*, 176 p.
- MALDONADO, D; ZULLI, P; SHEN, Y. S; GUO, B. Y; YU, A. B; ROGERS, H. (2006). “Application of a numerical model in the design of blast parameters and lance geometry for an ironmaking blast furnace”. *Fifth International Conference on CFD in the Process Industries. Melbourne, Australia, CSIRO*.
- MEHRABIAN, R; ZAHIROVIC, S; SCHARLER, R; OBERNBERGER, I; KLEDITZSCH, S; WIRTZ, S; SCHERER, V; LU, H; BAXTER, L. L. (2012). “A CFD model for thermal conversion of thermally thick biomass particles”. *Fuel Processing Technology*, vol. 95, pp. 96–108.
- MEHRABIAN, R. B. (2013). “CFD Simulation of the thermal conversion of solid biomass in packed bed furnaces”. *Teses de doutorado. Institute for Process and Particle Engineering, Graz University of Technology*, 175 p.
- MESA-PÉREZ, J. M; ROCHA, J. D; BARBOSA-CORTEZ, L. A; PENEDO-MEDINA, M; LUENGO, C. A; CASCAROSA, E. (2013). “Fast oxidative pyrolysis of sugar cane straw in a fluidized bed reactor”. *Applied Thermal Engineering*, vol. 56, pp. 167-175.
- MICHAELIDES, E. E. (2013). “Heat and Mass Transfer in Particulate Suspensions”. *Springer*, pp. 176.
- MORIN, J. X.; GAUVILLE, P.; SEMEDARD, J. C. (2001). “Development of Ultra Large CFB Boilers”, *Proceedings, 16th International Conference on Fluidized Bed Combustion*, (ed. D.W. Geiling), pp. 230–245.
- MORSI, A. J; ALEXANDER, S. A. (1972). “An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow System”. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 55, pp. 193-208.
- MORTARI, D. A; ÁVILA, I; DOS SANTOS, A. M; CRNKOVIC, P. M. (2010). “Study of thermal decomposition and ignition temperature of bagasse, coal and their blends”. *Thermal Engineering*, vol. 9, pp. 81–88.
- MOTHÉ, C. G; DE MIRANDA, I. C. (2013). “Study of kinetic parameters of thermal decomposition of bagasse and sugarcane straw using Friedman and Ozawa–Flynn–Wall isoconversional methods”. *Journal Thermal Anal Calorim*, vol 113, pp. 497–505.
- NACHILUK, K.; RAMOS, R. C. (2017). “Geração de bioenergia de biomassa da cana-de-açúcar nas usinas signatárias ao protocolo agroambiental paulista, safra 2015/2016”. *Análises e Indicadores do Agronegócio*, vol 12, nº 4.
- NAKOD, P. M. (2013). *CFD Modeling and Validation of Oxy-Fired and Air-Fired Entrained Flow Gasifiers. International Journal Chemical and Physical Science*. vol. 2(6), pp. 28–40.

- NOTA TÉCNICA “Potencial dos Recursos Energéticos no Horizonte 2050”, (2018). Ministério de Minas e Energia (MMA) e Empresa de Pesquisas Energéticas (EPE). Disponível em http://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-227/topico-416/NT04%20PR_RecursosEnergeticos%202050.pdf.
- NIKSA, S; KEYD, L. E; RUSSEL, W. B; SAVILLE, D. A. (1984). “On the role of heating rate in rapid coal desvolatalization”. In 20th Symposium (International) on Combustion. The combustion institute: Pittsburgh.
- NSAKALA, N. Y. A; ROBERT, H. E; PHILIP Jr, L. W. (1977). “Studies on coal reactivity: kinetics of lignite pyrolysis in nitrogen at 808° C”. Combustion Science and technology, vol. 16, pp. 153-163.
- NUNES, L. J. R; MATIAS, J. C. O; CATALAO, J. P. S. (2014). “Mixed biomass pellets for thermal energy production: A review of combustion models”. Applied Energy, vol.127, pp. 135-140.
- ÓRFÃO, J. J. M.; FIGUEIREDO, J. L. (2001). “A simplified method for determination of lignocellulosic materials pyrolysis kinetics from isothermal thermogravimetric experiments”. Thermochemica Acta. vol 380, pp. 67–78.
- PETERS, B; SCHRODER, E; BRUCH, C; NUSSBAUMER, T. (2002). “Measurements and particle resolved modelling of heat-up and drying of a packed bed”. Biomass and Bioenergy, vol. 23, pp 291-306.
- PETERS, B. (2003). “Thermal Conversion of Solid Fuels”, WIT Press.
- PHASOMPRAYOCH, M.; TANGCHAICHIT, K.; WONGWUTTANASATIAN, T. (2018). “Simulation of concentrated slop combustion in cyclone furnace using Computational Fluid Dynamics (CFD)”. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, vol 113, conference 1.
- PORTEIRO, J; GRANADA, E; COLLAZO, J; PATIÑO, D; MORÁN, J. C. (2009). “Numerical modeling of a biomass pellet domestic boiler. Energy Fuels, vol. 23, pp. 1067–1075.
- PROENZA, N. P; TRAVIESO, D. P; BLANCO, E. M; SANTANA, J. A; TUNA, C. E; SILVEIRA, J. L. (2016). “Comportamento Fluidodinâmico de partículas de bagaço de cana-de-açúcar”. Congresso Nacional de Engenharia Mecânica, CONEM 2016. pp. 1-11.
- RAMAJO-ESCALERA, B; ESPINA, A; GARCÍA, J. R; SOSA-ARNAO, J. H; NEBRA, S. A. (2006). “Model-free kinetics applied to sugarcane bagasse combustion”. Thermochemica Acta, vol 448, pp. 111–116.
- RIBEIRO, N. S. (2017). “Estudo termogravimétrico da combustão e oxícombustão de misturas carvão mineral-biomassa. Dissertação de Mestrado”. Universidade Estadual Paulista (Unesp), Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Brasil, 97 p.

- RODRIGUES, L. O. (2009). “Análise paramétrica de câmara de combustão de turbinas a gás utilizando CFD”, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 244 p.
- SAFARI, F; TAVASOLI, A; ATAELI, A. (2016). “Gasification of sugarcane bagasse in supercritical water media for combined hydrogen and power production: a novel approach”. *Int. J. Environ. Sci. Technol.* vol. (13) pp. 2393–2400. DOI 10.1007/s13762-016-1055-7.
- SARAVANAMUTTOO, H. I. H.; ROGERS, G. F. C.; COHEN, H.; STRAZNICKY, P. (2008). “Gas turbine theory”, 6^a edition, Pearson Education. Canada.
- SHIH, T. H; LIOU, W. W; SHABBIR, A; YANG, Z; ZHU, J. (1995). "A new eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows model development and validation". *Computers Fluids*, vol. 24 (3), pp. 227–238.
- SHIOZAWA, T. (2013). “Numerical modelling of multiphase flow in raceway of ironmaking blast furnace”. Tese de Doutorado. University of New South Wales, Australia, 183 p.
- SLOAN, D. G; SMITH, P. J; SMOOT, D. (1986). “Modeling of swirl in turbulent flow systems”. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol 12(3), pp. 163-250.
- SMITH, I. W. (1978). “The intrinsic reactivity of carbons to oxygen”. *Fuel*, vol. 57, pp. 409–414.
- SPALDING, D. (1971). *Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames*. In Symposium (International) on Combustion. Elsevier.
- STANMORE, B. R. (2010). “Generation of energy from sugarcane bagasse by thermal treatment”. *Waste and Biomass Valorization*, vol 1 (1), pp. 77–89. Doi:10.1007/s12649-009-9000-3.
- STRÖM, H; THUNMAN, H. (2013). “CFD simulations of biofuel bed conversion: A submodel for the drying and devolatilization of thermally thick wood particles”. *Combustion and Flame*, vol. 160, pp. 417–431.
- SYAMLAL, M; BISSETT, L. A. (1992). *METC Gasifier Advanced Simulation (MGAS) Model: Technical Note*. U.S. Department of Energy, Office of Fossil Energy, Morgantown Energy Technology Center. Morgantown, West Virginia, USA.
- SYRED, N; BEER, J. M. (1974). “Combustion in swirling flows: A review”. *Combustion and Flame*, vol. 23, pp. 143-201.
- SYRED, N; GUPTA, A. K; BEER, J. M. (1975). “Temperature and density gradient changes arising with the processing vortex core and vortex breakdown in swirl burners”. *Symposium (International) on Combustion*, vol. 15, pp. 587-597.
- SYRED, N; FICK, W; O'DOHERTY, T; GRIFFITHS, A. J. (1997). “The effect of the precessing vortex core on combustion in a swirl burner”. *Combustion Science and Technology*, vol. 125:1-6, pp. 139-157.

- SYRED, C.; FICK, W.; GRIFFITHS, A. J.; SYRED N. (2004). "Cyclone gasifier and cyclone combustor for the use of biomass derived gas in the operation of a small gas turbine in cogeneration plants". *Fuel* vol. 83, pp. 2381–2392.
- THUNMAN, H; NIKLASSON, F; JOHNSON, F; LECKNER, B. (2001). Composition of volatile gases and thermochemical properties of wood for modeling of fixed or fluidized beds. *Energy & Fuels*, vol. 15(6), pp. 1488-1497.
- TOPOROV, D. D. (2014). "Combustion of pulverised coal in a mixture of oxygen and recycled flue gas". Elsevier, pp. 180.
- TORQUATO, S. A.; RAMOS, R. C. "Biomassa da cana-de-açúcar e a geração de bioeletricidade em São Paulo: usinas signatárias ao Protocolo Agroambiental Paulista". *Informações Econômicas*, São Paulo, v. 43, n. 4, p. 59-68, set./out. 2013. Disponível em: < <http://www.iea.sp.gov.br/ftp/iea/publicacoes/ie/2013/tec6-1013.pdf> >. Acessado 01 de Outubro de 2017.
- TRAVERSO, A.; MASSARDO, A. F.; SCARPELLINI, R. (2006). "Externally Fired micro-Gas Turbine: Modelling and experimental performance". *Applied Thermal Engineering*, vol 26, pp. 1935–1941.
- URNS, S. R. (2000). "An introduction to combustion: concepts and applications". 2nd Edição, Boston: McGraw-Hill.
- UBHAYAKAR, S. K; STICKLER, D. B; VON ROSENBERG, C. W; GANNON, R. E. (1976). "Rapid devolatilization of pulverized coal in hot combustion gases". In 16th Symposium (International) on Combustion. The combustion institute: Pittsburgh.
- VAMVUKA, D. (2010). "Overview of Solid Fuels Combustion Technologies". In *Handbook of Combustion* (Eds M. Lackner, F. Winter and A.K. Agarwal). Doi: 10.1002/9783527628148.hoc056.
- VERSTEEG, H. K; MALALASEKERA, W. (2007). "An Introduction to Computational Fluid Dynamics" Second Edition. Prentice Hall. pp. 517.
- VYAZOVKIN, S; WIGHT, C. A. (1997). "Kinetics in solids". *Annual Review of Physical Chemistry*, vol. 48, pp. 125–149.
- WARZECHA, P.; BOGUSLAWSKI, A. (2014). "LES and RANS modeling of pulverized coal combustion in swirl burner for air and oxy-combustion". *Technologies. Energy* vol. 66, pp. 732-743.
- WESTBROOK, C; DRYER, F. (1981). "Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames". *Combustion Science and technology*, vol, 27(1), pp. 31-43.
- WERTHER, J. (1980). "47 Modeling and scale-up of industrial fluidized bed reactors". *Chemical Engineering Science*, vol. 35 (1-2), pp. 372–379.
- WILLIAMS, A; JONES, J. M; MA, L; POURKASHANIAN, M. (2012). "Pollutants from the combustion of solid biomass fuels". *Progress Energy Combustion Science*, vol. 38(2), pp. 113–137.

- WURZENBERGER, J. C; WALLNER, S; RAUPENSTRAUCH, H; KHINAST, J. G. (2002). “Thermal conversion of biomass: comprehensive reactor and particle modeling”. *AICHE Journal*, vol. 48, pp. 2398–2411.
- YANG, Y. B; NEWMAN, R; SHARIFI, V; SWITHEBANK, J; ARISS, J. (2007). “Mathematical modeling of straw combustion in a 38 MWe power plant furnace and effect of operating conditions”. *Fuel*, vol. 86, pp. 129–142.
- YARIN, L. P. (2012). “The Pi-Theorem, experimental fluid mechanics”. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- ZAHIROVIC, S; SCHARLER, R; OBERNBERGER, I. (2004). “Advanced CFD modelling of pulverised biomass combustion”. <https://graz.pure.elsevier.com/en/publications/advanced-cfd-modelling-of-pulverised-biomass-combustion>.
- ZANATTA, E. R; REINEHR, T. O; AWADALLAK, J. A; KLEINU, B. S. J; OLIVEIRA DOS SANTOS, J. B; BARICCATTI, R. A; ARROYO, P. A; DA SILVA, E. A. (2016). “Kinetic studies of thermal decomposition of sugarcane bagasse and cassava bagasse” *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol 125, pp. 437–445.
- ZHOU, C; LIU, G; WANG, X; QI, C. (2016). “Co-combustion of bituminous coal and biomass fuel blends”: Thermochemical characterization, potential utilization and environmental advantage. *Bioresource Technology*, vol. 218, pp. 418–427.

ANEXO A: CINÉTICA QUÍMICA DE COMBUSTÍVEIS SÓLIDOS

Inicialmente, nos ensaios experimentais, com o progresso da reação, é medida a perda de massa como uma função do tempo nos casos isotérmicos ou da temperatura nos casos não-isotérmicos, e em geral é reportada na forma normalizada conhecida como fração de conversão α a qual relaciona a massa inicial, m_0 , e massa final, m_∞ , da amostra em um tempo, t , qualquer. Para o caso isotérmico a massa atual, m_t , representa a massa num instante de tempo, t , e a fração de conversão é calculada como na Eq. (A.1).

$$\alpha = \frac{m_0 - m_t}{m_0 - m_\infty} \quad (\text{A.1})$$

Para o caso não isotérmico a massa m_T representa a massa quando atingida uma temperatura T e a fração de conversão é então calculada como na Eq. (A.2)

$$\alpha = \frac{m_0 - m_T}{m_0 - m_\infty} \quad (\text{A.2})$$

Posteriormente, a cinética de reações heterogêneas de materiais sólidos é descrita em uma única etapa. A equação geral da análise cinética é descrita com a Eq. (A.3). Esta equação permite calcular a energia de ativação E_a para uma conversão α .

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (\text{A.3})$$

Onde t é o tempo, $k(T)$ é a constante dependente da temperatura e $f(\alpha)$ é uma função chamada modelo de reação, que descreve a dependência da taxa de conversão cinética com a fração de conversão, α . A taxa constante dependente da temperatura é descrita pela equação de Arrhenius. Logo, a taxa de uma reação no estado sólido geralmente pode ser descrita por:

$$\frac{d\alpha}{dt} = A e^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} f(\alpha) \quad (\text{A.4})$$

Onde A é o fator pré-exponencial, E_a , a energia de ativação e R a constante universal dos gases. A Eq. (A.5) pode ser transformada em expressões de taxa não-isotérmica descrevendo as taxas de reação como uma função da temperatura para uma taxa de aquecimento constante, $\beta = dT/dt$.

$$\frac{d\alpha}{dT} = \frac{A}{\beta} e^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} f(\alpha) \quad (\text{A.5})$$

Posteriormente, aplicam-se uma das abordagens matemáticas para encontrar os três parâmetros cinéticos ($f(\alpha)$, E_a e A) conhecidos como “trio cinético” (RAMAJO-ESCALERA *et al* 2006; CENTENO, 2015).

Com relação aos métodos matemáticos, pode-se aplicar os métodos de ajuste de modelo ou métodos livres de ajuste de modelo. Nos métodos de ajuste de modelo o termo $f(\alpha)$ é determinado pelo ajuste de vários modelos de reação a dados experimentais. Subsequentemente, o $k(T)$ pode ser avaliado pela forma escolhida de $f(\alpha)$. Historicamente falando, os métodos de ajuste de modelos foram os primeiros e mais populares métodos, especialmente para experimentos isotérmicos. Eles foram amplamente utilizados por causa de sua capacidade de determinar diretamente o trio cinético. No entanto, estes métodos sofrem de vários problemas, entre os quais dois são de particular importância. A primeira é que experimentos não-isotérmicos fornecem informações sobre $k(T)$ e $f(\alpha)$, mas não em uma forma separada. Ou seja, o método é incapaz de fornecer um modelo de reação único. O segundo problema é que apenas um único par de parâmetros de Arrhenius resulta de cada aplicação do método de ajuste de modelo. A maioria das reações de estado sólido não são processos simples de uma etapa, e portanto uma combinação de etapas elementares seriais e paralelas deve resultar em uma energia de ativação que muda durante o curso da reação. Consequentemente, a popularidade desses métodos diminuiu recentemente em favor de métodos isoconversionais (RAMAJO-ESCALERA *et al.*, 2006).

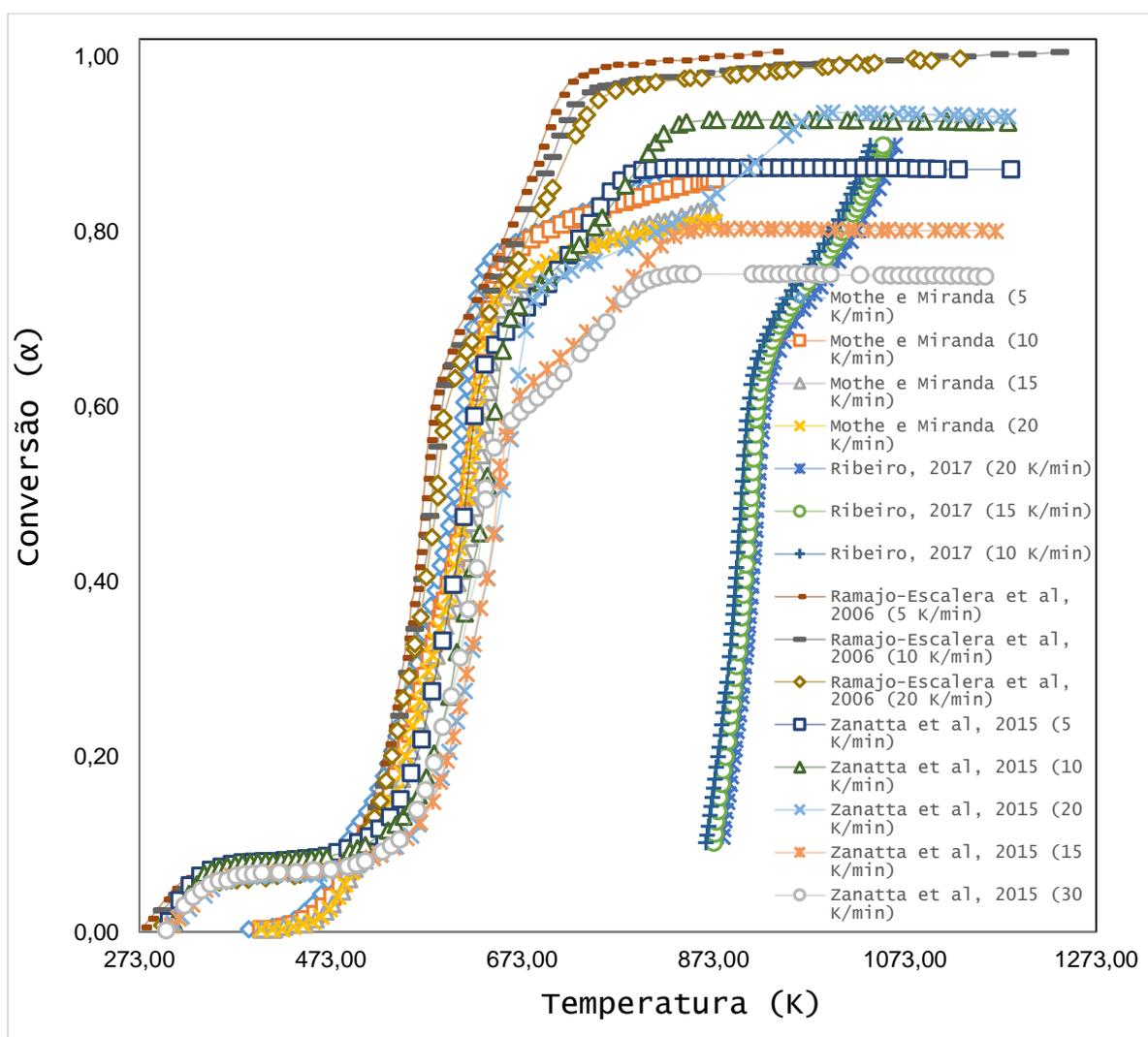
Os métodos isoconversionais (livres de ajuste de modelo) são capazes de avaliar os parâmetros cinéticos, especialmente a energia de ativação E_a em valores progressivos da fração de conversão α . Estes métodos requerem várias curvas cinéticas para levar a cabo a análise, e por isso tem sido chamados de métodos multicurvas por alguns autores (CENTENO, 2015). Então os métodos isoconversionais são muito interessantes, porque são capazes de considerar várias análises termogravimétricas do mesmo combustível a diferentes taxas de aquecimento β . Os métodos isoconversionais podem ser classificados em isotérmicos e não isotérmicos. Entre os métodos isotérmicos estão os métodos padrão, método de Friedman e AIC. Por sua vez, métodos não isotérmicos são o método de Kissinger, método de Ozawa, Flinn e Wall (OFW) e método de Vyazovkin & AIC.

A principal vantagem relacionada aos métodos isoconversionais é que a energia de ativação calculada E_a se obtém sem qualquer conhecimento prévio da forma analítica da função de conversão $f(\alpha)$. Como resultado, as informações cinéticas calculadas usando

métodos isoconversionais podem fornecer conhecimentos mais confiáveis sobre a cinética e o mecanismo de processos de reação complexos (MOTHÉ e DE MIRANDA, 2013).

O uso dos métodos isoconversionais como os métodos de Friedman e OFW para avaliar a cinética de decomposição térmica da biomassa elucidada mais claramente as mudanças que ocorrem no meio da reação causadas, principalmente por reações em pontos aleatórios com uma heterogeneidade existente (MOTHÉ e DE MIRANDA, 2013; ZANATTA *et al.*, 2016). Assim, métodos cinéticos isoconversionais não isotérmicos foram utilizados para estudar a cinética de decomposição térmica de diferentes materiais, por exemplo, o xisto betuminoso (MOINE *et al.*, 2016), carvão mineral (ÁVILA *et al.*, 2017), bagaço e palha de cana-de-açúcar (RAMAJO-ESCALERA *et al.*, 2006; CENTENO, 2015) e outras biomassa lignocelulósicas (CHEN *et al.*, 2015). A Figura A.1 mostra as curvas termogravimétricas dos diferentes estudos com bagaço de cana-de-açúcar.

Figura A.1- Curvas TG do bagaço de cana-de-açúcar de diferentes estudos.



ANEXO B: DADOS DAS SIMULAÇÕES REATIVAS

Modelo de turbulência SST k- ω

Região Da Câmara	Partícula	Diâmetro inicial [m]	Massa [kg]	Diâmetro [m]	Temperatura [K]	Tempo [s]	Alpha	Alpha char	Fração mássica H ₂ O	Fração mássica cinzas	Burnout [%]
Saída tubo de biomassa	0	6,20E-05	6,18E-11	6,15E-05	481,560	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	2373	6,36E-05	6,66E-11	6,30E-05	481,093	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	4747	6,29E-05	6,45E-11	6,23E-05	480,524	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	7120	6,24E-05	6,31E-11	6,19E-05	481,264	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	9493	6,40E-05	6,80E-11	6,34E-05	479,130	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	11867	6,33E-05	6,59E-11	6,28E-05	484,053	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	14240	6,29E-05	6,45E-11	6,23E-05	481,409	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	16613	6,22E-05	6,25E-11	6,17E-05	483,981	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	18987	6,38E-05	6,73E-11	6,32E-05	481,715	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	21360	6,33E-05	6,59E-11	6,28E-05	480,490	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	23733	6,27E-05	6,38E-11	6,21E-05	483,895	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	26107	6,20E-05	6,18E-11	6,15E-05	480,663	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	28480	6,38E-05	6,73E-11	6,32E-05	480,149	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	30853	6,31E-05	6,52E-11	6,26E-05	480,932	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
33227	6,24E-05	6,31E-11	6,19E-05	481,622	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356	
Saída combustor	0	6,20E-05	5,53E-11	5,95E-05	844,719	0,024	0,120	0,000	0,000	0,081	1,275
	2373	6,36E-05	5,62E-11	5,97E-05	862,408	0,029	0,178	0,000	0,000	0,086	1,794
	4747	6,29E-05	5,51E-11	5,94E-05	861,625	0,026	0,165	0,000	0,000	0,085	1,674
	7120	6,24E-05	5,72E-11	6,02E-05	848,539	0,021	0,106	0,000	0,000	0,080	1,157
	9493	6,40E-05	5,83E-11	6,05E-05	851,472	0,027	0,163	0,000	0,000	0,084	1,651
	11867	6,33E-05	5,61E-11	5,97E-05	850,042	0,025	0,169	0,000	0,000	0,085	1,708
	14240	6,29E-05	5,11E-11	5,79E-05	897,607	0,032	0,238	0,000	0,000	0,091	2,395
	16613	6,22E-05	5,30E-11	5,86E-05	847,957	0,025	0,173	0,000	0,000	0,085	1,744
	18987	6,38E-05	5,61E-11	5,97E-05	879,376	0,028	0,189	0,000	0,000	0,087	1,899
	21360	6,33E-05	5,26E-11	5,84E-05	995,799	0,029	0,230	0,000	0,000	0,090	2,308
	23733	6,27E-05	5,72E-11	6,02E-05	849,812	0,023	0,118	0,000	0,000	0,081	1,258
	26107	6,20E-05	4,72E-11	5,64E-05	892,111	0,032	0,270	0,000	0,000	0,095	2,747
	28480	6,38E-05	6,18E-11	6,18E-05	844,193	0,023	0,092	0,000	0,000	0,079	1,044
	30853	6,31E-05	4,91E-11	5,71E-05	880,452	0,032	0,283	0,000	0,000	0,096	2,904
33227	6,24E-05	5,65E-11	5,99E-05	847,916	0,025	0,120	0,000	0,000	0,081	1,272	
Saída câmara de combustão	0	6,20E-05	4,48E-12	3,18E-05	1242,530	0,215	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	2373	6,36E-05	4,82E-12	3,26E-05	1343,290	0,049	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	4747	6,29E-05	4,67E-12	3,22E-05	1340,900	0,152	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	7120	6,24E-05	4,58E-12	3,20E-05	1245,990	0,364	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	9493	6,40E-05	4,93E-12	3,28E-05	1363,320	0,054	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	11867	6,33E-05	4,77E-12	3,25E-05	1236,490	0,071	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	14240	6,29E-05	4,67E-12	3,22E-05	1356,020	0,049	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	16613	6,22E-05	4,53E-12	3,19E-05	1314,390	0,164	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	18987	6,38E-05	4,87E-12	3,27E-05	1254,070	0,132	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	21360	6,33E-05	4,77E-12	3,25E-05	1233,090	0,149	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	23733	6,27E-05	4,62E-12	3,21E-05	1189,570	0,159	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	26107	6,20E-05	4,48E-12	3,18E-05	1314,210	0,165	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	28480	6,38E-05	4,87E-12	3,27E-05	1368,670	0,203	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	30853	6,31E-05	4,72E-12	3,24E-05	1379,810	0,130	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
33227	6,24E-05	4,58E-12	3,20E-05	1221,810	0,153	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770	

Modelo de turbulência *Realizable k-ε*

Região Da Câmara	Partícula	Diâmetro inicial [m]	Massa [kg]	Diâmetro [m]	Temperatura [K]	Tempo [s]	Alpha	Alpha char	Fração mássica H ₂ O	Fração mássica cinzas	Burnout [%]
Saída tubo de biomassa	0	6,20E-05	6,18E-11	6,15E-05	479,742	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	2373	6,36E-05	6,66E-11	6,30E-05	484,289	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	4747	6,29E-05	6,45E-11	6,23E-05	478,765	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	7120	6,24E-05	6,31E-11	6,19E-05	480,526	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	9493	6,40E-05	6,80E-11	6,34E-05	480,034	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	11867	6,33E-05	6,59E-11	6,28E-05	480,985	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	14240	6,29E-05	6,45E-11	6,23E-05	479,578	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	16613	6,22E-05	6,25E-11	6,17E-05	481,886	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	18987	6,38E-05	6,73E-11	6,32E-05	480,281	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	21360	6,33E-05	6,59E-11	6,28E-05	478,989	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	23733	6,27E-05	6,38E-11	6,21E-05	480,668	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	26107	6,20E-05	6,18E-11	6,15E-05	479,934	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	28480	6,38E-05	6,73E-11	6,32E-05	478,420	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
	30853	6,31E-05	6,52E-11	6,26E-05	478,757	0,009	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356
33227	6,24E-05	6,31E-11	6,19E-05	481,384	0,010	0,000	0,000	0,002	0,072	0,356	
Saída combustor	0	6,20E-05	5,28E-11	5,86E-05	801,083	0,040	0,165	0,000	0,000	0,085	1,675
	2373	6,36E-05	5,98E-11	6,11E-05	807,151	0,033	0,115	0,000	0,000	0,080	1,231
	4747	6,29E-05	5,96E-11	6,11E-05	821,590	0,027	0,086	0,000	0,000	0,078	0,997
	7120	6,24E-05	5,86E-11	6,08E-05	809,634	0,027	0,080	0,000	0,000	0,078	0,953
	9493	6,40E-05	6,22E-11	6,19E-05	805,488	0,026	0,096	0,000	0,000	0,079	1,076
	9493	6,40E-05	4,93E-12	3,28E-05	840,547	0,107	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	9493	6,40E-05	4,93E-12	3,28E-05	1164,620	0,101	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	9493	6,40E-05	4,93E-12	3,28E-05	963,405	0,103	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	9493	6,40E-05	4,93E-12	3,28E-05	980,551	0,105	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	11867	6,33E-05	6,04E-11	6,14E-05	818,054	0,025	0,093	0,000	0,000	0,079	1,055
	14240	6,29E-05	5,77E-11	6,04E-05	812,047	0,029	0,120	0,000	0,000	0,081	1,275
	16613	6,22E-05	5,85E-11	6,07E-05	789,641	0,024	0,071	0,000	0,000	0,077	0,886
	16613	6,22E-05	4,53E-12	3,19E-05	1127,300	0,157	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	16613	6,22E-05	4,53E-12	3,19E-05	897,492	0,159	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	18987	6,38E-05	5,74E-11	6,02E-05	802,476	0,040	0,168	0,000	0,000	0,085	1,695
	21360	6,33E-05	5,80E-11	6,04E-05	806,096	0,033	0,136	0,000	0,000	0,082	1,409
	23733	6,27E-05	5,85E-11	6,07E-05	825,347	0,028	0,094	0,000	0,000	0,079	1,064
	26107	6,20E-05	5,23E-11	5,83E-05	819,507	0,032	0,176	0,000	0,000	0,086	1,773
	28480	6,38E-05	6,22E-11	6,19E-05	811,386	0,026	0,085	0,000	0,000	0,078	0,994
	30853	6,31E-05	4,72E-12	3,24E-05	806,409	0,155	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
30853	6,31E-05	5,86E-11	6,07E-05	786,467	0,033	0,115	0,000	0,000	0,080	1,233	
30853	6,31E-05	4,72E-12	3,24E-05	1172,820	0,151	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770	
33227	6,24E-05	5,65E-11	6,00E-05	830,337	0,032	0,118	0,000	0,000	0,081	1,262	
Saída câmara de combustão	0	6,20E-05	4,48E-12	3,18E-05	1345,810	0,065	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	2373	6,36E-05	5,90E-12	3,43E-05	1248,980	0,059	1,000	0,734	0,000	0,816	80,192
	4747	6,29E-05	5,59E-12	3,37E-05	1250,450	0,051	1,000	0,767	0,000	0,834	82,203
	7120	6,24E-05	4,58E-12	3,20E-05	1279,070	0,116	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	9493	6,40E-05	4,93E-12	3,28E-05	1335,260	0,132	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	11867	6,33E-05	4,77E-12	3,25E-05	1317,130	0,054	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	14240	6,29E-05	4,67E-12	3,22E-05	1383,610	0,055	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	16613	6,22E-05	4,53E-12	3,19E-05	1347,170	0,186	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	18987	6,38E-05	4,87E-12	3,27E-05	1297,760	0,069	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	21360	6,33E-05	4,77E-12	3,25E-05	1320,480	0,100	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	23733	6,27E-05	4,62E-12	3,21E-05	1344,560	0,057	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	26107	6,20E-05	4,48E-12	3,18E-05	1388,450	0,059	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	28480	6,38E-05	4,87E-12	3,27E-05	1257,400	0,056	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
	30853	6,31E-05	4,72E-12	3,24E-05	1274,130	0,177	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770
33227	6,24E-05	4,58E-12	3,20E-05	1270,690	0,061	1,000	0,997	0,000	0,998	99,770	