

ESTUDO NUMÉRICO DO SUPERAQUECIMENTO NOS TUBOS DE UMA
CALDEIRA DE QUEIMA TANGENCIAL SIMULTÂNEA COM GÁS NATURAL E
METANOL

João Coringa dos Santos Neto

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Engenharia
Mecânica, COPPE, da Universidade Federal
do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos
necessários à obtenção do título de Mestre
em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Rio de Janeiro

Abril de 2018

ESTUDO NUMÉRICO DO SUPERAQUECIMENTO NOS TUBOS DE UMA
CALDEIRA DE QUEIMA TANGENCIAL SIMULTÂNEA COM GÁS NATURAL E
METANOL

João Coringa dos Santos Neto

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA
(COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA

Examinada por:

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.

Prof. Albino José Kalab Leiroz, Ph.D.

Prof. Sergio Leal Braga, D.Sc.

Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2018

Santos, João Coringa dos

Estudo Numérico do Superaquecimento nos Tubos de uma Caldeira de Queima Tangencial Simultânea com Gás Natural e Metanol/João Coringa dos Santos Neto – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2018.

XV, 102 p. 29; 7cm.

Orientadores: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Dissertação (mestrado) - UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2018.

Referências Bibliográficas: p. 96-102.

1. Caldeiras Tangenciais. 2. Superaquecimento. 3. Fluidodinâmica Computacional. 4. Escoamentos reativos. I. Colaço, Marcelo José. *et al* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

Agradecimentos

Aos meus pais por toda a dedicação e sacrifícios em prol da minha educação e estudos. Verdadeiros exemplos de vida.

Ao meu colega de trabalho e grande amigo Mestre Fernando César por me dar o empurrão que faltava para encarar esse desafio.

Ao meu colega de trabalho e também amigo Doutor Eduardo Oliveira, cujo conhecimento e conselhos se mostraram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

À minha amiga Doutora Isadora Oliveira que, durante muito tempo, esteve ao meu lado nos momentos difíceis.

À equipe da ARAUCÁRIA NITROGENADOS S.A por me fornecer as informações necessárias à caracterização do problema estudado, sempre com bastante presteza.

Aos meus orientadores, Professores Marcelo José Colaço e Albino José Kalab Leiroz pela orientação e conselhos.

À Vera Noronha, por estar sempre disposta a ajudar durante toda minha estadia na Universidade.

Às minhas irmãs, familiares e amigos que, direta ou indiretamente, ajudaram e fazem parte deste trabalho.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.).

ESTUDO NUMÉRICO DO SUPERAQUECIMENTO NOS TUBOS DE UMA
CALDEIRA DE QUEIMA TANGENCIAL SIMULTÂNEA COM GÁS NATURAL E
METANOL

João Coringa dos Santos Neto

Abril/2018

Orientadores: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Programa: Engenharia Mecânica

O estudo numérico do escoamento reativo no interior de uma caldeira de queima tangencial, para investigar o fenômeno de superaquecimento nos tubos das paredes da fornalha, foi desenvolvido no presente trabalho. A caldeira simulada possui capacidade de geração de 255 t/h de vapor superaquecido, queimando simultaneamente gás natural e metanol em 20 queimadores distribuídos nas quinas dos quatro lados da fornalha. O escoamento em cada queimador foi detalhadamente simulado e os perfis de velocidade, temperatura e pressão nas saídas foram importados para interior da fornalha. A abordagem numérica envolveu a utilização dos modelos SST $k - w$, *Eddy Dissipation Concept* e Ordenadas Discretas para descrever o escoamento reativo turbulento e a transferência de calor por radiação. O processo multifásico de atomização do metanol líquido com ar comprimido foi tratado pelo Modelo de Mistura. Imagens com dados de temperatura no interior da fornalha foram coletadas por câmera de vídeo com medição por pirômetro para comparação com os resultados numéricos. Por fim, as regiões de superaquecimento foram identificadas.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

NUMERICAL STUDY OF STEAM TUBES OVERHEATING IN A NATURAL GAS AND METHANOL CO-FIRING TANGENTIAL BOILER

João Coringa dos Santos Neto

April/2018

Advisors: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Department: Mechanical Engineering

The numerical study of the reactive flow within a tangential firing boiler, to investigate the phenomenon of overheating in the furnace wall tubes, was developed in the present work. The capacity of the simulated boiler is 255 t/h of superheated steam, co-firing natural gas and methanol in 20 burners distributed on the corners of the furnace four sides. The flow in each burner was simulated in detail and the velocity, temperature and pressure profiles at the outlets were imported into the furnace. The numerical approach involved the use of the SST $k - w$, Eddy Dissipation Concept and Discrete Ordinate models to describe the turbulent reactive flow and the radiation heat transfer. The multiphase atomization process of the liquid methanol with compressed air was treated by the Mixing Model. Images with temperature data inside the furnace were collected by video camera with pyrometer measurement for comparison with numerical results. Finally, the overheating regions were identified.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas.....	xii
Lista de Símbolos	xiii
1. Introdução, motivação e objetivo	1
2. Revisão da Literatura	6
2.1. Modelagem numérica através de CFD	6
2.2. Fenômeno de Superaquecimento e Fluxo Crítico	8
3. Metodologia	11
3.1. Definição do Problema Físico	11
3.2. Modelagem do Escoamento e da Transferência de Calor	16
3.2.1. Equações de Conservação	16
3.2.2. Equações de Conservação para Escoamentos Multifásicos	19
3.2.3. Modelo de Turbulência	21
3.2.4. Modelo de Combustão	29
3.2.5. Modelo de Radiação.....	36
3.2.6. Modelo de Escoamento Multifásico.....	44
3.3. Modelagem dos Queimadores	49
3.3.1. Queimador de Gás Natural.....	50
3.3.2. Queimador de Metanol.....	53
3.3.3. Difusor de Ar Primário.....	57
3.4. Fornalha.....	61
3.5. Estudo de Independência de Malha.....	68
4. Resultados	71
4.1. Validação dos Modelos de Combustão Reduzidos	71
4.1.1. Modelo Reduzido de Combustão do Metano	71
4.1.2. Modelo Reduzido de Combustão do Metanol.....	74

4.2.	Estudo de Independência de malha	77
4.2.1.	Queimador de Metano	78
4.2.2.	Queimador de Metanol.....	80
4.2.3.	Difusor de Ar Primário.....	82
4.2.4.	Fornalha.....	85
4.3.	Verificação dos perfis de saída dos queimadores.....	87
4.4.	Verificação da solução com dados experimentais.....	89
4.5.	Análise do superaquecimento.....	91
5.	Conclusões e Recomendações.....	94
5.1.	Conclusões	94
5.2.	Recomendações de Trabalhos Futuros	96
6.	Referências Bibliográficas	98

Lista de Figuras

Figura 1. 1 - Esquema do interior da fornalha (seção transversal) de uma caldeira tangencial de quatro lados. Fonte: adaptado de ZHOU et al.[4].	2
Figura 2. 1 - Curva de vaporização – fluxo de calor contra diferencia de temperatura [11]	9
Figura 3. 1 - Esquema da seção transversal da fornalha da caldeira com os queimadores. Dimensões em milímetros.	12
Figura 3. 2 - Esquema do conjunto de queimadores instalado em cada canto da fornalha. Dimensões em milímetros. A: queimador de gás natural. B: Queimador de gás ácido. C: Queimador de metanol. D: Queimador de gás residual.	13
Figura 3. 3 - Caldeira completa com destaque para a região da fornalha e dos queimadores.	15
Figura 3. 4 - Fornalha da caldeira em perspectiva com suas dimensões em milímetros.	16
Figura 3. 5 - Camadas de turbulência próximas à paredes. Adaptado de KUNDU [22].	25
Figura 3. 6 - Queimador de gás natural. Dimensões em milímetros.	50
Figura 3. 7 - Detalhes da entrada e saída do queimador de gás natural. Dimensões em milímetros.	51
Figura 3. 8 – Modelo tridimensional do queimador de gás natural.	51
Figura 3. 9 – Malha utilizada no queimador de gás natural com destaque para as camadas de prismas nas paredes.	52
Figura 3. 10 – Dimensões do bico (esquerda) e da placa (direita) do queimador de metanol. Dimensões em milímetros.	54
Figura 3. 11 – Modelo tridimensional da placa e do bico do queimador de metanol.	54
Figura 3. 12 – Região de fluido do queimador de metanol.	55
Figura 3. 13 – Parte do queimador que foi simulada (simetria).	55
Figura 3. 14 – Malha utilizada no queimador de metanol com destaque para as camadas de prismas nas paredes.	56

Figura 3. 15 – Difusor de ar primário do queimador de metanol e suas dimensões, em milímetros.....	57
Figura 3. 16 – Modelo tridimensional do difusor de ar primário do queimador de metanol.	58
Figura 3. 17 – Região de fluido do difusor de ar primário do queimador de metanol. ...	58
Figura 3. 18 – Parte do difusor de ar primário do queimador de metanol (simetria).	59
Figura 3. 19 – Malha utilizada no difusor de ar primário do queimador de metanol com destaque para as camadas de prismas nas paredes.	60
Figura 3. 20 – Modelo tridimensional da fornalha com destaque para as entradas de combustíveis e de ar secundário.	62
Figura 3. 21– Malha utilizada na fornalha com destaque para as entradas de combustíveis e para as camadas de prismas nas paredes.....	63
Figura 4. 1 – Esquema do combustor BERL de 300 KW com suas dimensões e com a localização da linha utilizada para coletar os dados para a validação. Fonte: adaptado de YAN [52].	71
Figura 4. 2 – Perfis de velocidade radial ao longo da posição radial r para a combustão do metano.	72
Figura 4. 3 – Perfis de temperatura ao longo da posição radial r para a combustão do metano.	73
Figura 4. 4 – Perfis de concentração de O_2 ao longo da posição radial r para a combustão do metano	73
Figura 4. 5 – Perfis de velocidade radial ao longo da posição radial r para a combustão do metanol.	75
Figura 4. 6 – Perfis de temperatura ao longo da posição radial r para a combustão do metanol	76
Figura 4. 7 – Perfis de concentração de O_2 ao longo da posição radial r para a combustão do metanol.....	76
Figura 4. 8 – Detalhe da linha radial na saída do queimador de metano.....	78
Figura 4. 9 – GCI da malha M2 em relação à malha M1 para o queimador de gás natural.	79
Figura 4. 10 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para o queimador de gás natural.	79
Figura 4. 11 – Detalhe da linha radial na saída do queimador de metanol.....	80
Figura 4. 12 – GCI da malha M2 em relação à malha M1 para o queimador de metanol.....	81

Figura 4. 13 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para o queimador de metanol.....	82
Figura 4. 14 – Detalhe da linha na saída do difusor de ar primário.	83
Figura 4. 15 – GCI da malha M2 em relação à malha M1 para o difusor de ar primário.	84
Figura 4. 16 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para o difusor de ar primário.	84
Figura 4. 17– Detalhe da linha no plano transversal na altura dos queimadores.	85
Figura 4. 18– GCI da malha M2 em relação à malha M1 para a fornalha.	86
Figura 4. 19 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para a fornalha.	87
Figura 4. 20 – Perfis de velocidade na saída do queimador de metanol (esquerda) e interpolado na entrada da fornalha (direita).	88
Figura 4. 21 – Erro relativo entre o perfil de velocidade na saída do queimador de metanol e o interpolado na entrada da fornalha ao longo da linha radial da Figura 4.17.	88
Figura 4. 22 – Plano de visão da câmera na fornalha.	89
Figura 4. 23 – Plano de visão da câmera no modelo tridimensional.	89
Figura 4.24 – Imagem com medição de temperatura capturada pela câmera de vídeo da fornalha	89
Figura 4.25 – Perfil de temperatura do plano equivalente ao da imagem capturada pela câmera	89
Figura 4.26 – Isosuperfície da fração mássica de CO igual a 0,01 gerada nas simulações.....	90
Figura 4.27 – Perfis de temperatura nas paredes da fornalha.....	91
Figura 4.28 – Perfis de temperatura nos planos verticais.....	92
Figura 4.29 – Linhas de corrente coloridas pela temperatura.....	92

Lista de Tabelas

Tabela 3. 1 - Composição real do gás natural.....	14
Tabela 3. 2 - Composição real da corrente de metanol.	14
Tabela 3. 3 – Condições de contorno para o queimador de gás natural.	53
Tabela 3. 4 – Condições de contorno para o queimador de metanol.....	57
Tabela 3. 5 – Condições de contorno para o difusor de ar primário do queimador de metanol.	61
Tabela 3. 6 – Condições de contorno para a fornalha.	64
Tabela 3. 7 - Composição do gás natural para a simulação.....	66
Tabela 3. 8 - Composição da corrente de metanol para a simulação.....	66
Tabela 4. 1 – Número de elementos das malhas testadas pra o queimador de metano. .	78
Tabela 4. 2 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para o queimador de metano.	78
Tabela 4. 3 – Número de elementos das malhas testadas pra o queimador de metanol. 81	
Tabela 4. 4 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para o queimador de metanol.	81
Tabela 4. 5 – Número de elementos das malhas testadas pra o difusor de ar primário..	83
Tabela 4. 6 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para o difusor de ar primário.	83
Tabela 4. 7– Número de elementos das malhas testadas pra a fornalha.....	85
Tabela 4. 8 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para a fornalha.....	85

Lista de Símbolos

Caracteres latinos

a	coeficiente de absorção, 1/m
\mathbf{a}	aceleração, m/s ²
A_r	fator pré-exponencial da reação r , 1/K
C	coeficiente linear anisotrópico da função de fase
C_p	calor específico, J/kgK
C_j	concentração molar da espécie j , kmol/m ³
C_μ	constante
$D_{i,m}$	coeficiente de difusão da espécie i na mistura, m ² /s
$D_{T,i}$	coeficiente de difusão térmica, kg/m s
e	energia específica, J/kg
E_r	energia de ativação da reação r , J/kmol
f_i	fração volumétrica do componente/fase i
F_{ij}	Transferência de quantidade de movimento na interface das fases i e j , kg/m ² s ²
\mathbf{g}	vetor aceleração da gravidade, m/s ²
G	radiação incidente, W/m
h	entalpia específica, J/kg
I	intensidade de radiação, W/m ²
J_i	fluxo por difusão da espécie i , kg/m ² s
k	energia cinética turbulenta, m ² /s ²
k_d	constante de taxa da reação direta
k_i	constante de taxa da reação inversa
k_t	condutividade térmica turbulenta, W/mK
K	condutividade térmica, W/mK
M_M	massa molecular, kg/kmol
M_{ij}	taxa de transferência de massa entre as fases j e i , kg/m ³ s
n	índice de refração
N	número de componentes/fases
p	pressão, P
p_i	pressão parcial do componente/fase i , P
\mathbf{P}	tensor tensão normal ou tensor pressão, P

q	fluxo de calor, W/m ²
Q_{ij}	transferência de calor na interface das fases i e j , W/m ³
\mathbf{r}	vetor posição, m
R	constante universal dos gases, J/kmolK
R_i	taxa de produção/consumo da espécie i através de reações químicas, kg/m ³ s
R_{ij}	tensor tensão de Reynolds, P
\mathbf{s}	vetor direção
\mathbf{s}'	vetor direção do espalhamento
\mathbf{S}	tensor taxa de deformação, 1/s
Sc_t	número de Schmidt turbulento
S_e	termo fonte de energia, W/m ³ s
S_i	termo fonte da espécie i , kg/m ³ s
\mathbf{S}_v	termo fonte de quantidade de movimento, kg/m ² s
S_ϕ	termo fonte da propriedade ϕ
t	tempo, s
T	temperatura, K
\mathbf{T}	tensor tensão, N/m ²
\mathbf{v}	vetor velocidade, m/s
\mathbf{v}_i	vetor velocidade do componente/fase i , m/s
v_i	componente do vetor velocidade na direção de x_i , m/s
v'	coeficiente estequiométrico dos reagentes
v''	coeficiente estequiométrico dos produtos
y	Distância da parede à primeira camada de elementos da malha, m
Y_i	fração mássica ou molar do componente i

Caracteres gregos

β_r	expoente de temperatura para reação r
Γ	termo difusivo
δ_{ij}	tensor taxa de deformação, s ⁻¹
ε	taxa de dissipação turbulenta, m ² /s ³
ε_{ij}	taxa de deformação, s ⁻¹
Θ	efeito de terceiro corpo nas reações
η'	expoente de taxa de reação
λ	comprimento de onda, m

μ	viscosidade absoluta, kgm/s
μ_t	viscosidade turbulenta, kgm/s
ν	viscosidade cinemática, m ² /s
ν_t	viscosidade turbulenta cinemática, m ² /s
ξ^*	comprimento da escala fina, m
ρ	massa específica, kg/m ³
ρ_i	massa específica do componente/fase i, kg/m ³
σ_t	número de Prandtl,
σ_k	número de Prandtl turbulento para k
σ_ε	número de Prandtl turbulento para ε
σ_S	coeficiente de espalhamento
τ	tempo característico, s
ϕ	propriedade transportada
Φ	função de fase
Ω	ângulo sólido, sr

1.Introdução, motivação e objetivo

Ao longo da história, a humanidade vem desenvolvendo a tecnologia para tornar a vida e o trabalho mais confortáveis e produtivos. O uso seguro e eficiente do vapor d'água é um importantíssimo exemplo deste desenvolvimento.

Desde que o homem dominou o uso do fogo e conseguiu gerar vapor a partir da água, vem utilizando este recurso para aquecimento de ambientes e preparação de alimentos. A primeira utilização do vapor d'água com fins industriais data do século dezessete quando máquinas foram criadas para bombear a água das minas de carvão inglesas utilizando o chamado “poder de expansão do vapor” [1]. Hoje, o vapor representa papel importante na transformação de energia térmica em energia elétrica no mundo. A geração termoeletrica representou, em 2013, 78% da geração mundial de energia elétrica [2]. Vapor também é insumo importante na indústria. Ele aciona equipamentos e válvulas, aquece correntes de fluidos e participa de reações químicas. Está presente em indústrias como a de produção de papel, de alimentos, petróleo e gás e petroquímicas, entre outras.

A geração do vapor d'água também evoluiu ao longo da história, desde a máquina idealizada pelo grego Hero em 200 A.C., chamada eolípila, passando pela “caldeira vagão” de James Watt, no século dezoito, até as modernas caldeiras supercríticas de hoje.

Geradores de vapor, comumente chamados de caldeiras, variam de tamanho e capacidade, desde pequenas caldeiras para aquecimento de edificações até equipamentos capazes de produzir, individualmente, mais de 4000 toneladas por hora de vapor superaquecido para geração termelétrica [1].

De forma mais genérica, as caldeiras podem ser classificadas em flamatubulares e aquatubulares. As do primeiro tipo se caracterizam pela circulação dos gases de combustão internamente aos tubos. Já nas aquatubulares, mais utilizadas, os gases circulam por fora dos tubos e estes conduzem a água e o vapor. As caldeiras aquatubulares apresentam utilização mais ampla, pois possuem vasos pressurizados internamente de menores dimensões relativas. Isso viabiliza econômica e tecnicamente o emprego de maiores espessuras e, portanto, a operação em pressões mais elevadas. Outra característica importante deste tipo de caldeira é a possibilidade de adaptação de

acessórios, como superaquecedores, o que permite o fornecimento de vapor superaquecido, necessário ao funcionamento de turbogeradores a vapor.

Dentre as caldeiras aquatubulares, as de queima tangencial são equipamentos de geração de vapor com fornalhas de quatro, seis, oito ou até mais paredes de tubos, onde os queimadores, instalados em cada canto das paredes, são dispostos de forma que as correntes de combustível(eis) e de ar tangenciam um círculo imaginário na parte central da fornalha. A Figura 1. 1 apresenta um esquema da seção transversal da fornalha de uma caldeira tangencial de quatro lados. As chamas geradas pelo processo de combustão nesses equipamentos formam um círculo no interior da fornalha de modo que um grande vórtice é criado. Essas caldeiras são amplamente utilizadas em plantas de geração termoeletricas pelo seu alto grau de preenchimento do volume da fornalha pela chama, boa estabilidade da chama, boa adaptação à variação de carga (nos casos de queima de carvão) e baixa emissão de NO_x [3].

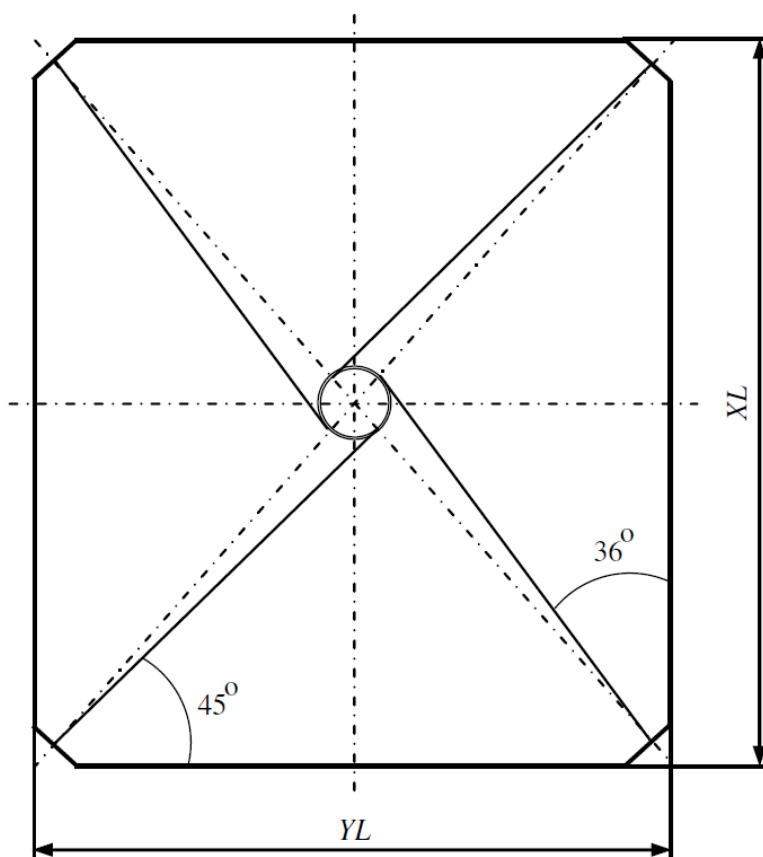


Figura 1. 1 - Esquema do interior da fornalha (seção transversal) de uma caldeira tangencial de quatro lados. Fonte: adaptado de ZHOU [4].

Nas caldeiras, a energia térmica pode ser provida através das seguintes formas: queima de combustíveis sólidos (por exemplo, carvão e lenha), líquidos (por exemplo, óleos derivados do petróleo, bioóleos) ou gasosos (por exemplo, gás natural); por resistências elétricas (eletrotermia); ou por fontes não convencionais, como a fissão nuclear, energia solar, energia geotérmica, etc. Dentro de plantas industriais, há ainda as caldeiras cuja fonte de energia térmica é oriunda de outros processos, promovendo um aproveitamento energético. Exemplos desses equipamentos são as caldeiras recuperadoras de calor, que usam a energia térmica dos gases produzidos em turbinas a gás, por exemplo, e as caldeiras que usam como combustíveis gases subprodutos de outros processos. Indústrias como a de produção de aço, refino de petróleo, produção de papel e processamento de alimentos são exemplos de aplicação desses geradores de vapor [1]. Na indústria de fabricação de fertilizantes, gases residuais gerados nos processos, como gás residual e gás ácido, são aproveitados como combustível complementar em fornalhas de fornos e de caldeiras que geram vapor para aquecimento na própria planta e força motriz para geração termoelétrica.

Um dos problemas comuns durante a operação de caldeiras aquatubulares, sobretudo em caldeiras de queima tangencial, é o superaquecimento dos tubos que formam as paredes da fornalha, o que pode levar à corrosão, ruptura e falha dos tubos; à parada da caldeira; e até mesmo à acidentes. Tubos danificados devem ser substituídos, o interior da fornalha deve ser inspecionado e, até que a caldeira volte à operação novamente, muito prejuízo é acumulado. Acredita-se que o desbalanceamento da temperatura dos gases e, conseqüentemente, da chama circular gerada pela queima tangencial seja a principal razão para tais problemas em caldeiras de queima tangencial [5]. Esse desbalanceamento pode ser intensificado quando são queimados diferentes combustíveis, com poderes caloríficos diferentes, nos queimadores tangenciais.

Experimentos práticos da combustão em caldeiras de queima tangencial são o mais antigo e eficaz método para entender esses fenômenos, porém apresentam grandes restrições relativas ao custo e risco, mesmo que realizados em escalas menores que as de equipamentos industriais.

Colaborando com estudos experimentais, métodos numéricos para modelagem do problema físico podem ser usados para conduzir experimentos computacionais que simulam inúmeros casos operacionais de maneira relativamente rápida, segura e confiável. A Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD – *Computational Fluid*

Dynamics) é um método numérico de solução de escoamentos de fluidos no qual as equações diferenciais parciais complexas que regem este tipo de problema são modeladas e transformadas em um sistema de equações algébricas. O domínio físico é dividido em inúmeras pequenas células que simulam os elementos diferenciais da modelagem analítica, e nelas o sistema de equações é resolvido numericamente ao longo de várias iterações.

A análise utilizando CFD se mostra uma ferramenta útil para a antecipação de resultados e previsão de desempenho de caldeiras em diferentes configurações de operação, tais como com diferentes combustíveis e/ou razões ar/combustível, operando em cargas parciais ou plena. Desse modo, sobretudo em relação às caldeiras tangenciais, a aplicação da ferramenta CFD representa uma opção para o dimensionamento otimizado da fornalha, das paredes de tubos, dos elementos internos, dos dutos de ar, etc. Também permite a elaboração de diagnósticos e soluções de problemas operacionais desses equipamentos oriundos de condições de operação não previstas ou de deficiências no projeto do conjunto.

Tomando como motivação uma caldeira de queima tangencial real numa fábrica de fertilizantes nitrogenados, que queima dois combustíveis diferentes, com problema de corrosão nos tubos das paredes da fornalha, causada possivelmente entre outros fatores, por superaquecimento, o presente trabalho pretende realizar um estudo de CFD do escoamento reativo que acontece em seu interior para investigar os pontos de superaquecimento.

O Objetivo dessa dissertação pode ser dividido em duas partes:

- 1) Desenvolvimento e verificação de simulações numéricas utilizando CFD do escoamento reativo no interior de uma caldeira de queima tangencial de 4 lados e 16 queimadores com capacidade de evaporação de 255 t/h de vapor, queimando gás natural e metanol. Para executar as simulações, é utilizado o pacote científico ANSYS@ WorkbenchTM, composto pelos *softwares* DesignModelerTM, MeshingTM, FluentTM e CFD-PostTM. A verificação é feita confrontando os dados das simulações com os dados reais coletados por uma câmera de supervisão de chama instalada no interior da fornalha;
- 2) Avaliação da distribuição da chama no interior da fornalha para determinar as características do escoamento no interior da fornalha,

como perfis de temperatura e identificar os pontos de superaquecimento.

As simulações numéricas a serem desenvolvidas nesta dissertação envolvem a elaboração de um modelo geométrico do interior da fornalha, a elaboração de modelos geométricos detalhados do interior dos queimadores e a aplicação e verificação de modelos matemáticos responsáveis pela solução das equações que governam a quantidade de movimento, a transferência de calor, a transferência de espécies e as reações químicas que acontecem no interior da fornalha. Tais modelos são capazes não só de diagnosticar o possível desbalanceamento da chama e do aporte térmico (objetivo do presente trabalho) como podem ser utilizados também para prever o comportamento e o desempenho da caldeira em outros casos operacionais demandados pela planta e para otimizar a operação da caldeira, economizando combustível e ampliando a vida útil do equipamento. Os referidos modelos matemáticos poderão ser utilizados, inclusive para descrever e estudar o escoamento reativo no interior de caldeiras com padrões geométricos e combustíveis semelhantes.

2. Revisão da Literatura

2.1. Modelagem numérica através de CFD

Mundialmente, carvão ainda é o combustível mais utilizado em caldeiras industriais, por sua boa relação poder calorífico/custo. Por isso, a modelagem da combustão do carvão pulverizado é dominante entre os estudos de CFD aplicados à caldeiras. No entanto, a literatura também reporta estudos realizados sobre caldeiras que aproveitam os gases oriundos de algum processo principal como combustíveis auxiliares, inclusive estudos feitos em caldeiras tangenciais que queimam mais de um combustível simultaneamente.

Os pesquisadores estão interessados, geralmente, em estudar a eficiência do equipamento e a qualidade das emissões. Porém, problemas de superaquecimento e falha dos tubos que formam as paredes da fornalha de uma caldeira também são objeto de análise e são encontrados na literatura. Segundo HE [6], acredita-se que o desbalanceamento da temperatura dos gases e da chama circular gerada pela queima seja uma das principais razões para problemas em caldeiras tangenciais.

Dentre as referências utilizadas no presente trabalho, serão citados os registros que mais contribuíram para o desenvolvimento da metodologia que será empregada.

GUBBA [3] simulou numericamente a operação de uma caldeira de queima tangencial de capacidade 300 MW utilizando um modelo de aquecimento de partículas para modelar a queima conjunta de carvão e biomassa (12% do biocombustível) utilizando o *solver* ANSYS@ FluentTM. A influência do tamanho e do formato das partículas de biomassa nas características da combustão e das emissões foi investigada. Foram utilizados os modelos *realizable k-ε* para a turbulência, ordenadas discretas para a radiação, além de modelos de combustão de partículas para o carvão pulverizado e para a biomassa.

HABIB [5] investigou numericamente o problema de formação de NO numa caldeira de 1699 MW com queima tangencial em 32 queimadores utilizando o ANSYS@ FluentTM. Campos de temperatura e de concentração de NO foram obtidos para diversos regimes de operação utilizando *Eddy Dissipation Concept* (EDC) como modelo de combustão, com diferentes valores de excessos de ar, com o desligamento e com a variação do ângulo de um ou mais queimadores. Seus resultados mostram que a formação de NO aumenta com o aumento da temperatura do ar de combustão e que o

desligamento de um ou mais queimadores provoca distorção e deslocamento do vórtice de chama.

HWANG [7] estudou o uso da tecnologia de recirculação e requeima de cinzas numa caldeira de 500 MW queimando tangencialmente carvão pulverizado. Simulações numéricas foram realizadas com o pacote ANSYS@ FluentTM para determinar as melhores condições de fornecimento de cinzas na fornalha e sua influência na performance da caldeira. Foram utilizados os modelos $k-\varepsilon$ para a turbulência, P1 para a radiação e o modelo de taxa de reação cinética/difusiva de superfície para a combustão do carvão.

TANG [8] desenvolveu um modelo numérico utilizando o pacote ANSYS@ FluentTM para modelar uma caldeira de queima tangencial com capacidade de 200 MW de uma siderúrgica utilizando gases residuais da fabricação do aço e gás natural como combustíveis. O autor investigou o superaquecimento nas paredes dos tubos da fornalha e realizou um estudo paramétrico para determinar a influência da vazão de gás natural na temperatura dos tubos. A validação dos resultados foi feita comparando os perfis de temperatura de um plano na altura dos queimadores com imagens de uma câmera térmica. Neste trabalho as paredes da fornalha foram modeladas como adiabáticas, o que poderia levar a temperaturas mais altas do que as reais nas paredes. O autor considerou as áreas com temperaturas entre 750 e 900K como áreas de superaquecimento. De acordo com os resultados, para baixas cargas de gás natural, os gases não conseguem formar o vórtice de fogo e as chamas tendem a se aproximar das paredes causando superaquecimento em alguns pontos. Consequentemente, os picos de temperatura para os casos de menor carga são maiores que para os casos de carga média. Para o terceiro caso estudado, de carga alta, o vórtice formado aumenta de tamanho e suas extremidades se aproximam das paredes fazendo com que pontos de superaquecimento também apareçam. Em suma, os autores encontraram um ponto ótimo de carga de gás natural para mitigar os pontos de superaquecimento nas paredes da fornalha.

ZHOU [4] realizou estudos experimentais e numéricos em ma caldeira de queima tangencial de 600 MW, com ênfase no escoamento dos gases de combustão na zona de convecção e na influência dos desvios de temperatura dos gases nas falhas da caldeira. Os autores identificaram, para cada configuração de internos da caldeira, os desvios sofridos pelas velocidades tangencial e *swirl* (de giro). Foi utilizado o modelo $k-$

ε e o algoritmo de acoplamento velocidade-pressão SIMPLE [9] pra modelar a turbulência.

DIAS [10] modelou a combustão sem chama visível do gás natural em um queimador de geometria cilíndrica e 16 injetores de combustível e a formação de NO_x. Para modelar a radiação, o autor utilizou o modelo das ordenadas discretas com 4 divisões para os ângulos *theta* e *phi*.

Os trabalhos anteriores fizeram uso, configuraram e validaram os modelos físicos e numéricos utilizados na presente dissertação. Portanto, o estudo dos mesmos foi essencial para o desenvolvimento deste trabalho.

Em nenhuma das modelagens visitadas na revisão bibliográfica foi empregado um estudo de convergência de malha sistemático, seguindo um método específico. Além disso, as paredes da fornalha sempre são modeladas como adiabáticas ou com temperaturas prescritas, desconsiderando a espessura das mesmas. A camada de óxido formada em consequência da ação da água no interior dos tubos também não foi levada em consideração. Os trabalhos normalmente também não modelam os queimadores e assumem que os fluxos de combustíveis e ar entram na fornalha ortogonalmente às paredes, sem ângulos relativos entre as correntes. O presente trabalho superou todas as dificuldades apresentadas, representando um avanço na literatura referente à modelagem em CFD de caldeiras e câmaras de combustão.

2.2. Fenômeno de Superaquecimento e Fluxo Crítico

Um caso de transferência de calor e escoamento de fluidos de grande importância para a geração de vapor é o processo de vaporização da água e o escoamento bifásico de líquido e vapor. Em termos gerais, vaporização é o fenômeno em que uma substância passa do estado líquido para o de vapor sem mudança de temperatura ou de pressão a medida que recebe calor contínuo. Em uma caldeira, a vaporização ocorre nos tubos da fornalha por onde a água escoava até o tubulão. O fato da vaporização envolver altas taxas de transferência de calor torna o processo de vaporização apropriado para o resfriamento desses tubos que estão expostos diretamente à chama na fornalha.

Um ponto de extrema importância que deve ser analisado durante o projeto e operação de grandes geradores de vapor é a mudança repentina no padrão do

escoamento bifásico da água no interior dos tubos que pode causar a perda da capacidade de resfriamento dos tubos, ocasionando superaquecimento e possível falha. A figura 4.1 ilustra a curva de vaporização da água para o caso de um fio aquecido dentro de um reservatório, resultado da investigação de vários pesquisadores e que cuja interpretação pode ser estendida ao caso do escoamento ascendente no interior de um tubo reto, como no interior da fornalha.

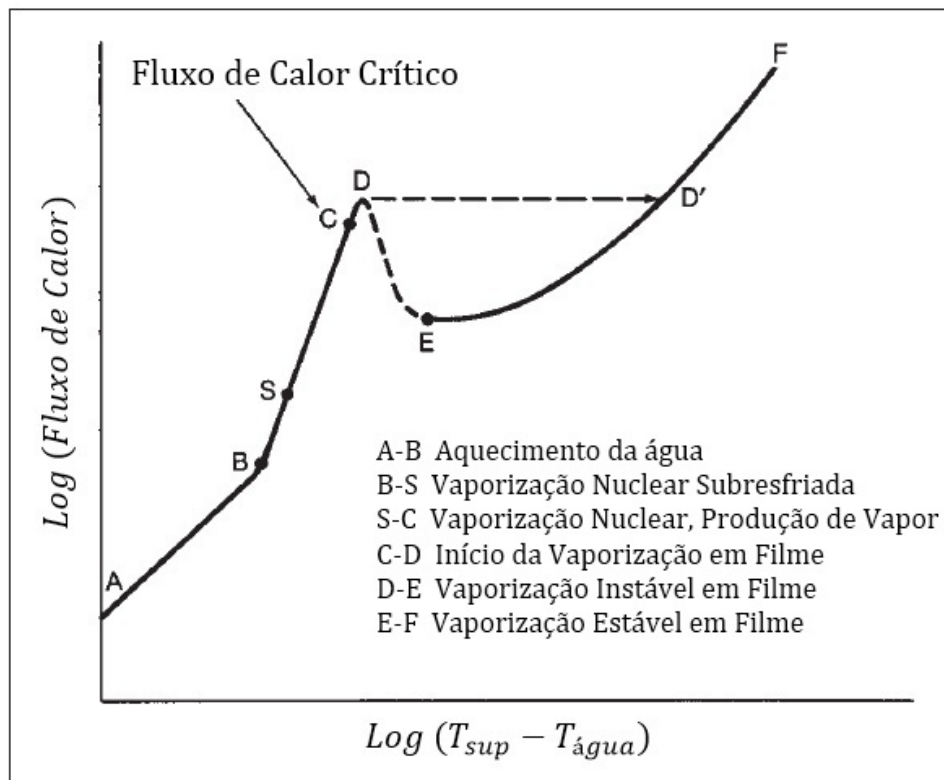


Figura 2. 1 - Curva de vaporização – fluxo de calor contra diferença de temperatura. Fonte: adaptado de STEAM [11].

Do ponto A ao ponto B, a troca de calor por convecção resfria a superfície. Nesse trecho ainda não há vaporização e o fluxo é governado pela lei do resfriamento de Newton. Passando do ponto B, o fluido imediatamente adjacente à superfície aquecida excede ligeiramente a temperatura de saturação enquanto o interior permanece subresfriado. Entre os pontos B e S, pequenas bolhas são formadas na superfície e colapsadas quando entram em contato com o restante do fluido. Do ponto S ao C, a temperatura média do fluido atinge a temperatura de saturação e as bolhas são formadas não só na superfície aquecida. Até o ponto C, o fluxo de calor da superfície para a água cresce numa taxa bem mais alta que a temperatura e no trecho C-D começa a se formar de um filme de vapor ao redor da superfície. Eventualmente, a vaporização se torna tão ampla que o filme de vapor se estabelece na superfície, isolando-a.

Neste momento a capacidade de resfriamento de superfície pelo fluido é reduzida drasticamente. O comportamento da temperatura da superfície nessas condições depende de como é realizado o aquecimento. Para os casos em que o aporte de calor depende da temperatura da superfície, como nos geradores de vapor nucleares, o fluxo reduz à medida que a temperatura aumenta (trecho D-E). Como nas caldeiras de combustão o fluxo de calor nos tubos se mantém o mesmo, independente da temperatura, o isolamento causado pelo filme de vapor faz com que a temperatura salte do ponto D para o ponto D' na figura 4.1. Esse fenômeno é chamado de **Crise da Vaporização** e o fluxo de calor no início desse processo chamado fluxo de calor crítico

O fluxo de calor crítico é determinado pelas configurações da caldeira, como diâmetro, material e espessura dos tubos, nível de pressão e temperatura do líquido e vapor saturados e condições do escoamento como velocidade ascendente e número de recirculação da água. O procedimento mais utilizado para monitorar as condições do fluxo de calor nas paredes dos tubos e evitar o superaquecimento é a medição direta ou indireta da temperatura dos tubos. De maneira geral, para tubos feitos de aço carbono, temperaturas da parede acima de 900 °F, ou 482 °C são indicativos da perda da capacidade de troca térmica da água em função da formação do filme isolante de vapor e início do superaquecimento [11].

O aumento repentino da temperatura dos tubos da fornalha durante a Crise da Vaporização é extremamente prejudicial à segurança e à continuidade operacional de uma caldeira. Por isso, durante o projeto e operação destes equipamentos, é importante manter nas regiões de maior fluxo de calor, como na fornalha, a vaporização nuclear para resfriar adequadamente os tubos evitar o superaquecimento e consequente falha.

3. Metodologia

3.1. Definição do Problema Físico

O equipamento que será objeto da simulação é uma caldeira de queima tangencial de quatro lados com capacidade de evaporação de 255 t/h de vapor, modelo RRP-BOX da CBC que faz parte de uma fábrica de fertilizantes nitrogenados da Petróleo Brasileiro S/A. - Petrobras. Sua finalidade é produzir vapor superaquecido utilizado para aquecimento e alimentação de turbinas de acionamento de compressores e bombas da planta. A caldeira é suprida por água de alimentação tratada e condensado das turbinas de acionamento através do sistema de bombeamento e passa por um preaquecimento no economizador antes de ser injetada no tubulão da caldeira.

A água é vaporizada e superaquecida juntamente com vapor saturado gerado pelas caldeiras de recuperação de calor da planta e enviado para a caldeira tangencial. O vapor é superaquecido até dois níveis de temperatura. Vapor em 95 bar e 410°C é extraído e enviado para a planta, e vapor a 92 bar e 492°C é enviado para os turbo geradores.

Após a expansão para 40 bar nas turbinas de geração, a maior parte do vapor retorna à caldeira nas condições de 39 bar e 375°C e é submetido a novo superaquecimento até 485°C, retornando, em seguida, para os turbo geradores, aumentando a eficiência global do sistema.

O ar, na temperatura ambiente, é insuflado pelo ventilador de ar forçado no aquecedor de ar regenerativo. Uma vez preaquecido, o ar é conduzido aos queimadores.

O sistema de queima da caldeira está distribuído em dois patamares e nos quatro cantos da fornalha (A, B, C e D). Dos queimadores os fluxos de combustíveis e de ar são dirigidos ao centro da fornalha, formando um círculo imaginário em sentido anti-horário na seção transversal da fornalha. A Figura 3. 1 apresenta um esquema da seção transversal da fornalha onde é possível ver os quatro cantos. É possível observar também os ângulos que os queimadores formam com as paredes da fornalha, responsáveis pela formação da chama quase circular. A este tipo de queima dá-se o nome de queima tangencial.

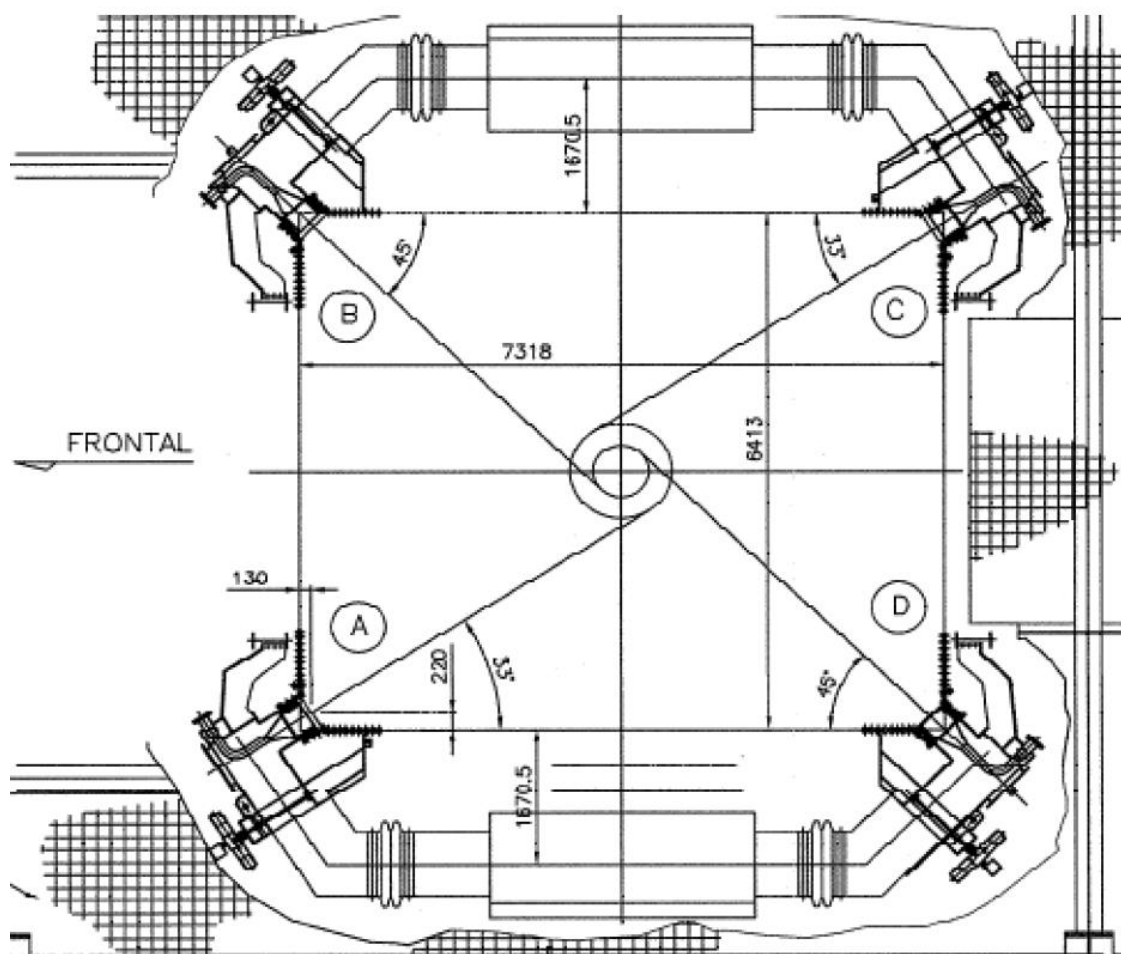


Figura 3. 1 - Esquema da seção transversal da fornalha da caldeira com os queimadores. Dimensões em milímetros. Fonte: documentação da caldeira. Fonte: documentação técnica da caldeira.

A caldeira possui doze queimadores de gás natural, sendo dois conjuntos instalados no primeiro patamar e um instalado no segundo; quatro queimadores de gás ácido instalados no primeiro patamar; e quatro queimadores de metanol mais quatro queimadores de gás residual no segundo patamar. A Figura 3. 2 mostra um esquema do conjunto de queimadores instalado em cada canto da fornalha e suas dimensões. O metanol é admitido na caldeira no estado líquido e ar comprimido é utilizado como agente atomizador. O gás ácido é um gás rico em água (96% em volume) e o gás residual é uma corrente gasosa rica em monóxido de carbono e nitrogênio molecular (47,35% e 37,10% em volume, respectivamente). A operação da caldeira envolve a queima simultânea ou não dessas correntes, a depender dos demais processos da planta, responsáveis pela geração destes combustíveis. Na maior parte do tempo somente o gás natural e o metanol são queimados e, quando o gás ácido e o gás residual são

queimados, suas vazões são bem menores que dos anteriores. Na condição operacional simulada neste trabalho os combustíveis queimados são o gás natural e o metanol. Os demais queimadores estão fora de operação. Dados experimentais foram coletados durante a operação queimando esses dois combustíveis somente. As Tabelas 3.1 e 3.2 apresentam as composições do gás natural e da corrente de metanol, respectivamente.

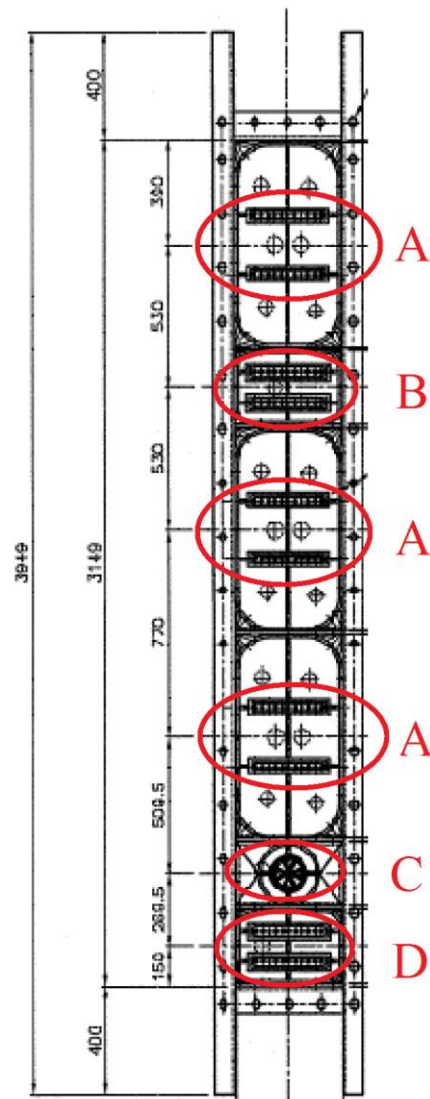


Figura 3. 2 - Esquema do conjunto de queimadores instalado em cada canto da fornalha. Dimensões em milímetros. A: queimador de gás natural. B: Queimador de gás ácido. C: Queimador de metanol. D: Queimador de gás residual. Fonte: documentação técnica da caldeira.

Tabela 3. 1 - Composição real do gás natural. Fonte: documentação técnica da caldeira.

Componente	Fração molar
Metano	0,8912
Etano	0,059
Propano	0,0177
n-Butano	0,0093
Nitrogênio	0,0157
Dióxido de Carbono	0,007
Oxigênio	0,0001

Tabela 3. 2 - Composição real da corrente de metanol. Fonte: documentação técnica da caldeira.

Componente	Fração molar
Metanol	0,95
Sulfeto de Hidrogênio	0,006
Cianeto de Hidrogênio	0,0026
Amônia	0,003
Água	0,0384

Os gases de combustão gerados, depois de transferir a maior parte do calor para a água e o vapor, na caldeira, são aproveitados no economizador e preaquecedor de ar. Por fim, são descartados para a atmosfera pela chaminé.

A Figura 3. 3 apresenta o interior da caldeira inteira com destaque em azul para a região da fornalha que será simulada e, em vermelho, para os queimadores.

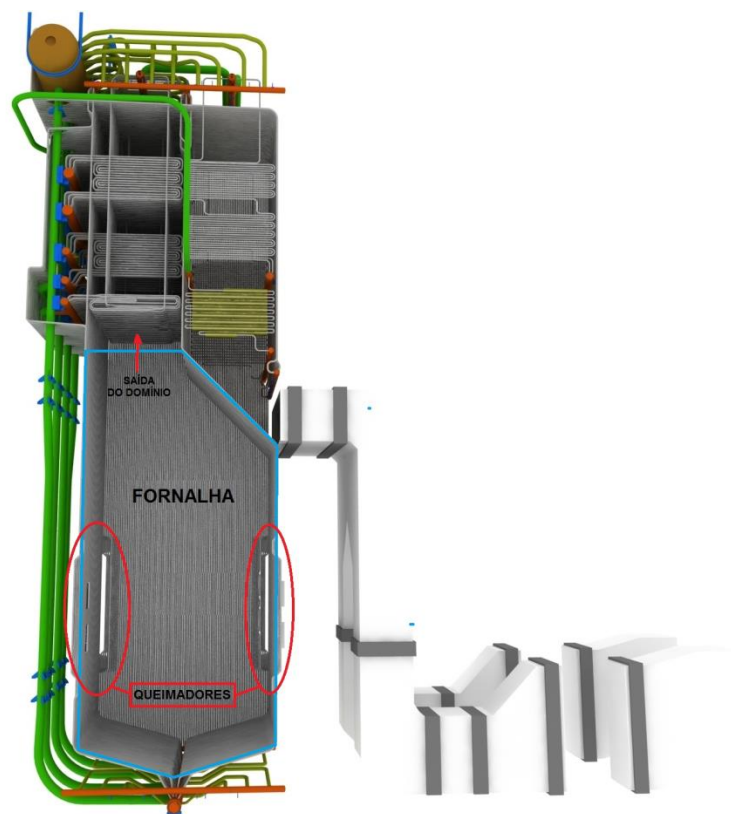


Figura 3. 3 - Caldeira completa com destaque para a região da fornalha e dos queimadores.
Fonte: documentação técnica da caldeira.

A caldeira em estudo apresenta um histórico de superaquecimento nos tubos que formam as paredes da fornalha, inclusive de falha mecânica dos tubos. De acordo com a literatura apresentada, este problema pode estar relacionado ao desbalanceamento da chama circular formada no interior da fornalha pelo diferente aporte térmico que é suprido por cada queimador, nos casos de operação com diferentes combustíveis.

A combustão em vórtice que acontece no interior da fornalha é um fenômeno complexo que envolve reações químicas em escoamentos turbulentos que liberam elevadas quantidades de energia por radiação. Esse fenômeno, fortemente influenciado pelas condições de injeção e vazões dos combustíveis queimados, caracteriza o problema físico do presente trabalho. A Figura 3. 4 mostra a fornalha em perspectiva com suas dimensões.

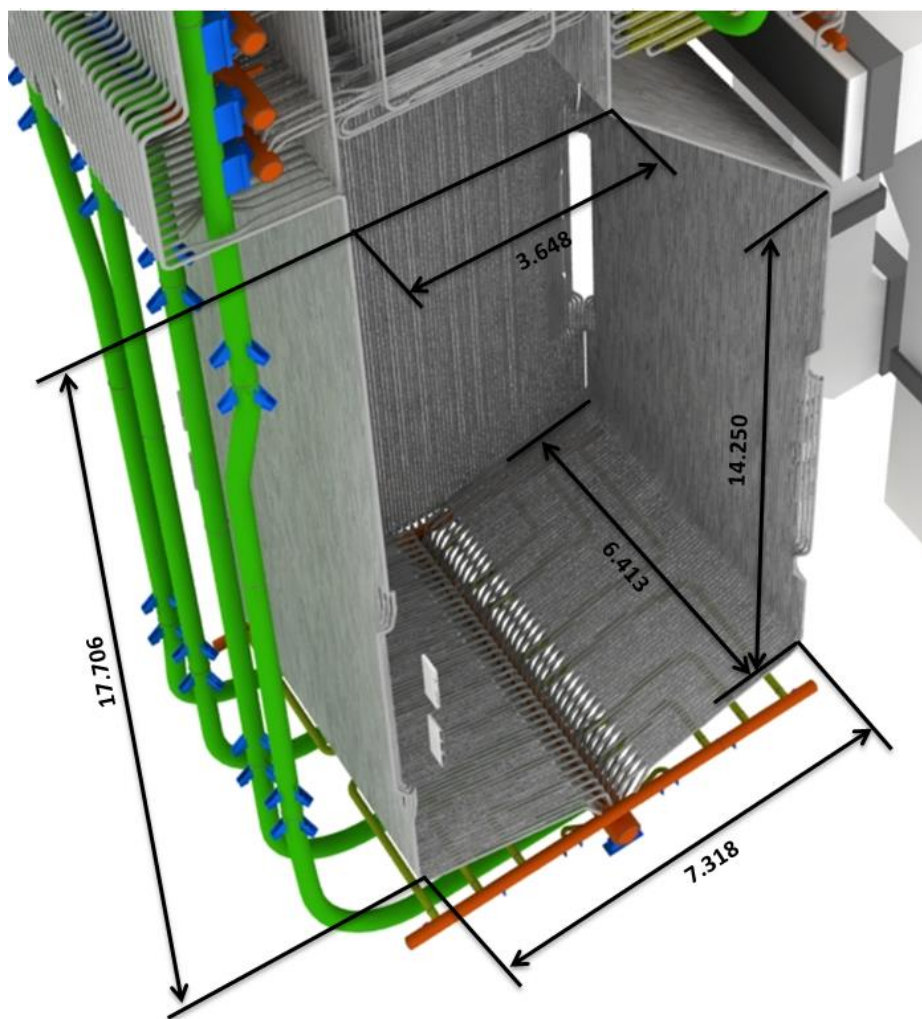


Figura 3. 4 - Fornalha da caldeira em perspectiva com suas dimensões em milímetros. Fonte: documentação técnica da caldeira.

3.2. Modelagem do Escoamento e da Transferência de Calor

3.2.1. Equações de Conservação

O modelo matemático empregado neste trabalho é baseado na solução numérica das equações diferenciais parciais de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e de espécies que regem o escoamento reativo numa abordagem Euleriana. Essas equações tridimensionais são resolvidas para descrever a dinâmica do escoamento reativo e as suas características térmica e química. Para a solução dessas equações, serão utilizados modelos de turbulência, de combustão, de transferência de calor e de transporte de espécies.

As equações governantes de conservação podem ser expressas da seguinte forma geral [12]:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{v}) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

A Equação (3.1) é a equação de transporte para a propriedade ϕ [12]. Ela explicita os vários processos de transporte: a taxa de variação com o tempo da propriedade ϕ e o termo convectivo no lado esquerdo; e o termo difusivo (Γ) e o termo fonte (S_ϕ) do lado direito. A propriedade ϕ assume o valor unitário para a conservação da massa, da velocidade para a conservação da quantidade de movimento, da energia para a conservação da mesma e da fração mássica ou molar de um componente para o transporte de espécies, conforme apresentado a seguir.

(i) Equação de Conservação da Massa (Equação da Continuidade):

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0 \quad (3.2)$$

O primeiro termo no lado esquerdo é a taxa de variação no tempo da massa específica do fluido. O segundo é o termo convectivo e descreve o fluxo total de massa através das fronteiras do volume de controle.

(ii) Equação de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{S}_v \quad (3.3)$$

onde \mathbf{T} é o tensor tensão definido como:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 2\mu \frac{\partial v_1}{\partial x_1} - P & \mu \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) & \mu \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_3} + \frac{\partial v_3}{\partial x_1} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1} + \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) & 2\mu \frac{\partial v_2}{\partial x_2} - P & \mu \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_3} + \frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_1} + \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \right) & \mu \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_3} \right) & 2\mu \frac{\partial v_3}{\partial x_3} - P \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Os termos a esquerda da Equação (3.3) representam a variação temporal local e o fluxo líquido convectivo de quantidade de movimento. O primeiro termo do lado direito descreve o somatório de forças de superfície e de pressão e o segundo representa o somatório das demais forças de campo e as fontes de quantidade de movimento.

(iii)Equação de Conservação da Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathbf{T} \mathbf{v}) + \nabla \cdot [\mathbf{K} \nabla T] + S_e \quad (3.5)$$

onde e é definido por:

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} + gzh \quad (3.6)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da Equação (3.5) representa a variação temporal e o fluxo líquido convectivo de energia. Do lado direito da equação, os termos descrevem o trabalho líquido realizado sobre o fluido, a quantidade de calor adicionada/retirada e o termo fonte de energia.

(iv)Equação de Transporte de Espécies:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i + R_i + S_i \quad (3.7)$$

onde, para escoamentos turbulentos:

$$J_i = - \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{S_{C_t}} \right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (3.8)$$

Os termos do lado esquerdo da Equação (3.8) representam a variação temporal e o fluxo líquido convectivo da espécie i . Do lado direito, o primeiro termo descreve o fluxo líquido difusivo, o segundo a taxa de produção/consumo da espécie i através de reações e o terceiro o termo fonte.

3.2.2. Equações de Conservação para Escoamentos Multifásicos

Fundamentalmente, o processo de combustão é um fenômeno multicomponente, em cuja análise devem ser resolvidas as equações de conservação levando em consideração a concentração de cada espécie presente no domínio. Além disso, um dos combustíveis utilizados na caldeira é admitido em estado líquido nos queimadores (metanol) e misturado com ar comprimido para atomização, caracterizando um escoamento bifásico. A seguir são apresentadas as equações de conservação para um sistema multicomponente e/ou multifásico.

(i) Equação de Conservação da Massa (Equação da Continuidade):

$$\frac{\partial(f_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_i \rho_i \mathbf{v}_i) = \sum_{j \neq i}^{nf} M_{ij} + S_i \quad (3.9)$$

Os termos a esquerda na Equação (3.9) representam as mesmas quantidades que na Equação (3.2) para cada fase. Os termos no lado direito descrevem a taxa de transferência de massa entre as fases i e j e o termo fonte do fase i .

(ii) Equação de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(f_i \rho_i \mathbf{v}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_i \rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i) = \nabla \cdot \mathbf{T}_i + \sum_{j \neq i}^{nf} (M_{ij} \mathbf{v}_j - M_{ji} \mathbf{v}_i) + \sum_{j \neq i}^{nf} F_{ij} + \mathbf{S}_{vi} \quad (3.10)$$

onde \mathbf{T} é o tensor tensão para cada componente/fase.

Os termos na Equação (3.10) representam as mesmas quantidades que na Equação (3.3), para cada fase i . No lado direito, além do somatório de forças e do termo fonte, há a transferência de quantidade de movimento consequente da transferência de massa entre as fases e suas interfaces.

(iii) Equação de Conservação da Energia:

$$\frac{\partial(f_i \rho_i e_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_i \rho_i e_i \mathbf{v}_i) = \nabla \cdot [K_i \nabla T_i] + \sum_{j \neq i}^{nf} (M_{ij} e_j - M_{ji} e_i) + \sum_{j \neq i}^{nf} Q_{ij} + S_{ei} \quad (3.11)$$

onde e é definido por:

$$e_i = h_i - \frac{p_i}{\rho_i} + \frac{v_i^2}{2} \quad (3.12)$$

Os termos na Equação (3.11) representam as mesmas quantidades que na Equação (3.5), para cada fase i . No lado direito, além do fluxo de calor e do termo fonte, há a transferência de calor consequente da transferência de massa entre as fases e suas interfaces.

3.2.3. Modelo de Turbulência

A maioria dos escoamentos presentes em equipamentos industriais, sobretudo naqueles sujeitos à combustão, ocorre em regime turbulento. Este fenômeno, apresentado em escoamentos com elevado número de Reynolds, se caracteriza por um comportamento espacial e temporal, com um grande número de graus de liberdade [13]. Em estudos utilizando dinâmica dos fluidos computacional (CFD), existem três formas de modelar a turbulência: DNS, LES e RANS. DNS, ou *Direct Numerical Simulation* é um método que consiste em resolver as equações de conservação da quantidade de movimento para todas as escalas de turbulência e regimes do escoamento. LES, ou *Large Eddy Simulation*, é uma técnica que resolve as equações de Navier-Stokes em escalas maiores de tempo e espaço e modela as equações nas escalas menores. Os efeitos da turbulência que ocorrem em escalas abaixo das escalas da malha são modelados. Apesar de possuírem melhor acurácia e nível de detalhamento, tanto DNS como LES representam custos computacionais extremamente elevados em função do alto número de elementos gerados na discretização do domínio da fornalha, o que inviabiliza o seu uso no presente trabalho.

O terceiro método, RANS, modela todas as escalas da turbulência, resolvendo as equações médias de Navier-Stokes. As variáveis na equação do movimento são divididas em duas partes: uma média temporal, dada pela Equação (3.13) e outra flutuante, num processo chamado de decomposição de Reynolds [13].

$$\bar{\phi} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \phi \, d\tau \quad (3.13)$$

Assim, a parcela flutuante é descrita da seguinte forma:

$$\phi' = \phi - \bar{\phi} \quad (3.14)$$

O escoamento avaliado neste estudo poderá apresentar variações de massa específica consideráveis, provocadas pelos altos gradientes de temperatura. Por isso, é

também aplicado o conceito de média da Favre, conforme Equação (3.15), para decompor as variáveis em uma parte flutuante e outra média em relação à massa específica.

$$\tilde{\phi} = \frac{\int \rho(t)\phi(t)dt}{\int \rho(t)dt} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (3.15)$$

Da mesma forma, a parcela flutuante é descrita da seguinte forma:

$$\phi'' = \phi - \tilde{\phi} \quad (3.16)$$

Inserindo as expressões (3.14) e (3.16) nas equações da continuidade e da conservação da quantidade de movimento, e desprezando as variações na viscosidade, obtém-se as *Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations*, ou RANS, representadas aqui em notação indicial:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (R_{ij}) + \rho g_i \quad (3.18)$$

onde $R_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j}$.

O sobrescritos $(-)$, (\sim) e $('')$ denotam média temporal, média e flutuações de Favre, respectivamente e R_{ij} representa o tensor tensão de Reynolds.

O tensor tensão de Reynolds é um tensor de segunda ordem simétrico, que representa seis novas incógnitas no sistema e, por isso, deve ser modelado. Em RANS, há duas formas de modelar R_{ij} : os *Reynolds-Stress Models* (RSM), no qual o tensor é

resolvido diretamente via equações de transporte, adicionando sete novas equações ao sistema; e os *Eddy Viscosity Models* (EVM), que usam a hipótese de Boussinesq [13]. para assumir que o tensor tensão de Reynolds é diretamente proporcional ao tensor taxa de deformação através da viscosidade turbulenta, μ_t :

$$R_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (3.19)$$

O método RSM é bem mais caro computacionalmente que o EVM e geralmente de difícil convergência [15]. Por isto, na maioria dos casos, RSM é usado apenas quando se sabe que o EVM não funciona [15].

O tensor tensão de Reynolds pode ser resolvido por diferentes maneiras em EVM. Nos modelos semi-empíricos, denominados $k - \varepsilon$, desenvolvidos por LAUNDER e SPALDING [17, 18], a viscosidade turbulenta μ_t é modelada pela relação de Prandtl-Kolmogorov:

$$\mu_t = C_\mu \frac{\bar{\rho} k^2}{\varepsilon} \quad (3.20)$$

Os modelos $k - \varepsilon$ são baseados em duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta (k) e outra para a taxa de dissipação turbulenta (ε). O termo C_μ na Equação (3.20) é uma constante empírica. O modelo conhecido como $k - \varepsilon$ *Standard* se tornou popular devido à sua simplicidade e custo e eficácia [19], representando um modelo de duas equações usualmente aceitável em escoamentos simples e em casos onde o transporte de turbulência pode ser considerado caracteristicamente difusivo. Porém, YEOH [20] aponta que este modelo apresenta dificuldades em prever os efeitos de turbulência em regiões de expansão abrupta e de recirculação, situações presentes no escoamento da fornalha.

Modificações foram introduzidas no modelo $k - \varepsilon$, originando os modelos RNG $k - \varepsilon$ (*Renormalization Group* $k - \varepsilon$) e *Realizable* $k - \varepsilon$. Essencialmente, tais modelos apresentam a mesma estrutura do *Standard*, diferindo-se principalmente [21]

quanto ao método de cálculo da viscosidade turbulenta e aos números de Prandtl turbulento que governam a difusão da turbulência. Apesar destes modelos apresentarem melhorias que aumentam a robustez e agilizam a convergência numérica da solução, ainda são limitados em regiões onde os efeitos viscosos são predominantes, como a subcamada viscosa e pelas restrições intrínsecas da hipótese de viscosidade turbulenta isotrópica (a presença das paredes faz com que o escoamento próximo seja anisotrópico) [21].

A maior limitação dos modelos $k - \varepsilon$ se encontra na dificuldade de modelagem próximo às paredes, que representam as principais fontes de vorticidade e turbulência. Diferentes experimentos demonstram que a região do escoamento próxima da parede pode ser dividida em três camadas: subcamada viscosa, camada intermédia e completamente turbulenta [22]. A Figura 3. 5 mostra as 3 camadas e inclui a velocidade adimensional U^+ em função da distância adimensional da parede y^+ para escoamentos com três Re diferentes. y^+ é muito importante para modelagem da turbulência próximo às paredes e se relaciona com U^+ através da Lei da Parede. O nível de refinamento da malha utilizada em simulações de CFD depende do modelo utilizado para resolver as camadas junto às paredes e cada modelo requer um y^+ máximo. Por isso, a distância para a parede da primeira camada de elementos é definida essencialmente em função do y^+ através da Equação (3.21).

$$y^+ = \frac{y}{\nu} \sqrt{\tau_0 / \rho} \quad (3.21)$$

onde y é a distância da parede para a primeira camada de elementos e τ_0 é a tensão de cisalhamento na parede.

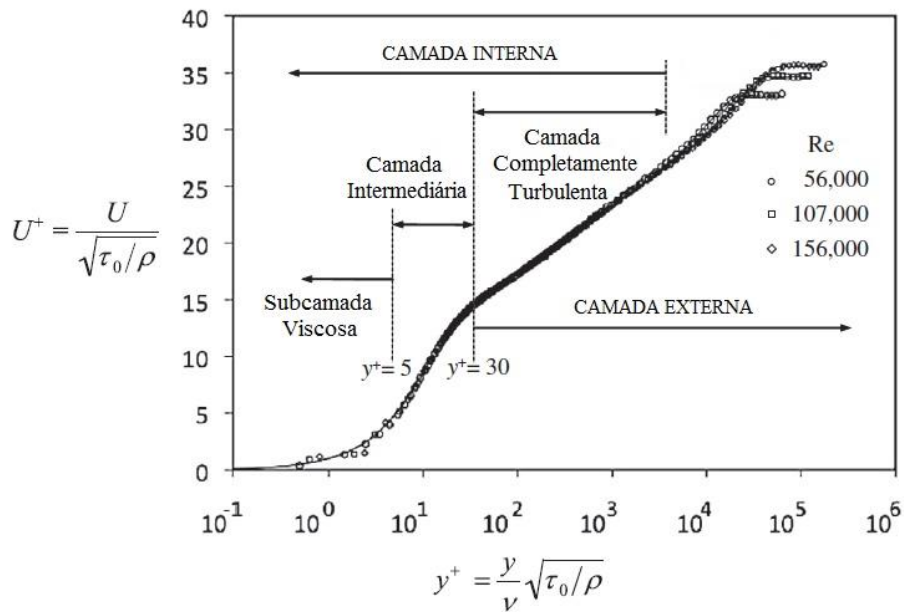


Figura 3. 5 - Camadas de turbulência próximas à paredes. Fonte: adaptado de KUNDU [22].

Em problemas de arrasto aerodinâmico não desprezível, ou de fluxos altamente viscosos, gradientes de pressão adversos com descolamento de camada limite, o efeito de proximidade da parede é significativo e se faz necessária a resolução da subcamada viscosa, levando a uma malha mais refinada ($y^+ = 1$).

Como alternativa à limitação apresentada pelos modelos $k - \varepsilon$ para a solução de escoamentos de camada limite, o modelo $k - \omega$, originalmente proposto por KOLMOGOROV [23], representa uma opção de modelagem para uma larga faixa de tipos de escoamento em presença de gradientes reversos de pressão, tendo sido validado em escoamentos com separação, transição, jatos e de baixo Re.

A diferença entre o modelo $k - \omega$ e o $k - \varepsilon$ se encontra na escolha da variável da segunda equação de transporte. No modelo $k - \omega$, ω é a taxa de dissipação específica ou por unidade de energia cinética (ε/k), também conhecida como frequência de turbulência.

O modelo *Standard* $k - \omega$, conforme proposto por WILCOX [24] é um modelo empírico de duas equações reformulado em relação à estrutura do $k - \omega$ original, que incorpora correções de baixo Reynolds, fatores de compressibilidade e dissipação de k e ω .

Apesar de ser mais adequado para modelagem das camadas do escoamento mais próximas das paredes, as soluções para a energia cinética turbulenta e para a taxa de dissipação específica do modelo $k - \omega$ possuem alta sensibilidade na camada logarítmica para casos de gradientes de pressão adversos, acima dela, e na região de escoamento livre, afetando negativamente a resolução do escoamento.

Para desenvolver um modelo que combinasse a independência em relação à corrente livre do modelo $k - \varepsilon$ com a formulação robusta e precisa nas regiões próximas das paredes do $k - \omega$, MENTER [25] propôs o modelo SST (*Shear-Stress Transport*) $k - \omega$. As principais modificações adotadas são a introdução de um termo adicional de difusão cruzada (D_ω) que combina os dois modelos, a ponderação zonal dos coeficientes através do uso de uma função de transição (*blending function*, F_1) e mudanças nos termos difusivos, de produção e de dissipação de k e ω . Outra modificação importante é a modelagem da viscosidade turbulenta que leva em consideração o transporte da tensão de cisalhamento turbulenta (*turbulent shear stress*), Equação (3.22), responsável pela predição mais acurada da separação do escoamento nas paredes. No modelo SST, a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação específica são obtidas pelas Equações (3.23) e (3.24).

$$\mu_t = \frac{\rho k}{\omega} \frac{1}{\max \left[\frac{1}{\alpha^*}, \frac{SF_2}{a_1 \omega} \right]} \quad (3.22)$$

onde S é a intensidade do tensor taxa de deformação:

$$S = \sqrt{2\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}}$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - R_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial u_i} - \beta^* \rho k \omega + S_k \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \frac{\rho \alpha \alpha^*}{\mu_t} R_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial u_i} - \beta \rho \omega^2 + D_\omega + S_\omega \quad (3.24)$$

Para a Equação (3.23):

$$\sigma_k = \frac{1}{F_1/\sigma_{k,1} + (1 - F_1)/\sigma_{k,2}} \quad , \quad \sigma_{k,1} = 2,0 \quad , \quad \sigma_{k,2} = 1,0$$

$$\beta^* = \beta_i^* [1 + \zeta^* F(M_t)]$$

Para a Equação (3.24):

$$\sigma_\omega = \frac{1}{F_1/\sigma_{\omega,1} + (1 - F_1)/\sigma_{\omega,2}} \quad , \quad \sigma_{\omega,1} = 2,0 \quad , \quad \sigma_{\omega,2} = 1,168$$

$$\alpha = \frac{\alpha_\infty}{\alpha^*} \left(\frac{\alpha_0 + Re_t/R_\omega}{1 + Re_t/R_\omega} \right) \quad , \quad \alpha^* = \alpha_\infty^* \left(\frac{\alpha_0^* + Re_t/R_k}{1 + Re_t/R_k} \right)$$

$$\alpha_\infty = F_1 \alpha_{\infty,1} + (1 - F_1) \alpha_{\infty,2} \quad , \quad \alpha_{\infty,1} = \frac{\beta_{i,1}}{\beta_\infty^*} - \frac{K^2}{\sigma_{\omega,1} \sqrt{\beta_\infty^*}} \quad , \quad \alpha_{\infty,2} = \frac{\beta_{i,2}}{\beta_\infty^*} - \frac{K^2}{\sigma_{\omega,2} \sqrt{\beta_\infty^*}}$$

$$R_\omega = 2,95 \quad , \quad R_k = 6 \quad , \quad \alpha_0 = \frac{1}{9} \quad , \quad \alpha_0^* = \frac{\beta_i}{3} \quad , \quad \alpha_\infty^* = 1 \quad , \quad K = 0,41$$

$$\beta_i = 0,072 \quad , \quad \beta_{i,1} = 0,075, \quad \beta_{i,2} = 0,0828, \quad \beta_\infty^* = 0,09$$

$$\beta = \beta_i \left[1 - \frac{\beta_i^*}{\beta_i} \zeta^* F(M_t) \right] \quad , \quad \beta_i = F_1 \beta_{i,1} (1 - F_1) \beta_{i,2} \quad , \quad Re_t = \frac{\rho k}{\mu \omega}$$

$$D_\omega = 2(1 - F_1) \rho \frac{1}{\omega} \sigma_{\omega,2} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}$$

Para ambas as equações:

$$F_1 = \tanh(\Phi_1^4)$$

$$\Phi_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega y}, \frac{500 \mu}{\rho y^2 \omega} \right), \frac{4 \rho k}{\sigma_{\omega,2} D_\omega^+ y^2} \right]$$

$$D_{\omega}^+ = \max \left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right)$$

$$F(M_t) = \begin{cases} 0 & M_t \leq M_{t0} \\ M_t^2 - M_{t0}^2 & M_t > M_{t0} \end{cases}, \quad M_t^2 = \frac{2k}{a^2}, \quad M_{t0} = 0,25, \quad a = \sqrt{\gamma RT}$$

$$\beta_i^* = \beta_{\infty}^* \left[\frac{4/15 + (Re_t/R_{\beta})^4}{1 + (Re_t/R_{\beta})^4} \right]$$

$$\zeta^* = 1,5, \quad R_{\beta} = 8, \quad \beta_{\infty}^* = 0,09$$

Os termos S_k e S_{ω} são os termos fonte da energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação específica, respectivamente.

Resolvidas as equações de transporte para a energia cinética turbulenta e para a taxa de dissipação específica, a viscosidade turbulenta e o tensor tensão de Reynolds são determinados pelas Equações (3.22) e (3.19) e, em seguida, são resolvidas equações médias de Navier-Stokes.

Em termos comparativos, o modelo SST $k - \omega$ apresenta um nível maior de detalhamento em cálculos computacionais de escoamentos turbulentos pelas melhorias implementadas através da combinação das soluções dos modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$, o que permite uma transição suave entre estes a partir da função de transição $F1$ e que possibilita um melhor tratamento do transporte da tensão de cisalhamento turbulenta em camadas limites. Segundo estudo de ALENCAR [26] o SST $k - \omega$ é o modelo de maior precisão dentre os de duas equações. Neste estudo, foram realizados testes de validação de diferentes modelos de turbulência na geometria do combustor anular FLOXCOM [27], desenvolvido por um consórcio de institutos e empresas com o objetivo de criar uma câmara de combustão de baixa emissão de NOx, levantar seus dados experimentais e disponibilizá-los na literatura. ALENCAR [26] comparou os modelos $k - \varepsilon$, RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$. Este apresentou o menor desvio médio padrão da magnitude da velocidade média adimensional com referência à velocidade de entrada de ar.

A utilização dos métodos para modelar a turbulência DNS e LES implicam em um custo computacional excessivo e proibitivo para o estudo proposto no presente trabalho, principalmente ao se considerar o elevado número de elementos das malhas. O uso do método RANS, com o modelo SST $k - \omega$ será utilizado, por ser o melhor dos

modelos de duas equações e por sua adequada relação custo/benefício. Tal modelo deve mostrar resultados satisfatórios, conforme reporta a literatura [28, 29, 30].

3.2.4. Modelo de Combustão

Ao resolver a equação do transporte de espécies, Equação (3.7), a taxa de produção/consumo R_i de cada espécie i através de reações químicas é calculada através de um modelo de combustão. Os problema objeto de estudo deste trabalho é a descrição do escoamento reativo e turbulento, resultado da combustão não pré-misturada de dois combustíveis diferentes – gás natural e metanol no interior da fornalha. Tendo isto em mente, o primeiro passo para caracterizar a combustão é verificar, dentre os modelos disponíveis, quais permitem a introdução de dois combustíveis diferentes nas reações. Importante também para o modelo escolhido é que ele possa descrever com suficiente precisão o comportamento do escoamento reativo e que não dificulte a convergência da solução e o tempo computacional gasto.

Uma das abordagens para se modelar a combustão não pré-misturada é a utilização de um escalar conservado chamado fração de mistura. A base dos modelos que empregam esse conceito é o fato de que, com algumas simplificações, a condição termoquímica do fluido pode ser relacionada a este escalar e a interação entre química e turbulência pode ser descrita através de uma função densidade de probabilidade, ou PDF (*Probability Density Function*), de modo a evitar a solução das equações de conservação para cada espécie envolvida no escoamento.

A fração de mistura f pode ser definida em termos das frações mássicas dos elementos conforme Equação (3.25), onde Z_i é a fração mássica do elemento i e os subscritos *ox* e *comb* denotam as correntes de oxidante e de combustível nas entradas, respectivamente.

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,comb} - Z_{i,ox}} \quad (3.25)$$

Baseado no conceito de fração de mistura, para o caso de chamas não pré-misturadas, se distinguem três regiões: região da corrente de combustível ($f = 1$), região da corrente de oxidante ($f = 0$) e a região da reação (f entre 0 e 1). A grande

vantagem dos modelos baseados na fração de mistura é que, assumindo a mesma difusividade para todos os participantes das reações, as equações de conservação das espécies podem ser reduzidas a uma única equação de conservação da fração de mistura. Os termos fonte para os elementos químicos se cancelam, uma vez que estes são conservados nas reações e, assim, f se torna um escalar conservado. Enquanto que a condição de mesma difusividade pode ser problemática para escoamentos laminares, para escoamentos turbulentos pode ser aceitável, nos quais a convecção supera a difusão molecular [31]. O ANSYS@ FluentTM modela a equação de conservação de f para escoamentos turbulentos utilizando médias de Favre, conforme a equação a seguir:

$$\frac{\partial(\rho \bar{f})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{f} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{K}{C_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \bar{f} \right] \quad (3.26)$$

onde K é a condutividade térmica da mistura, C_p o calor específico da mistura, σ_t o número de Prandtl e μ_t a viscosidade turbulenta.

A relação entre os valores médios e instantâneos da fração de mistura e das propriedades do escoamento é dada pela relação química/turbulência, e está descrita por meio das tabelas de PDF. Resumidamente, o conceito de PDF, proposto por LIBBY [32,33] e representado aqui como $p(f)$, pode ser descrito como a fração de tempo em que um elemento de fluido, em uma dada posição, se encontra em um estado termoquímico f . $p(f)$ pode ser expresso matematicamente como:

$$p(f) \Delta f = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_i \tau_i \quad (3.27)$$

onde T é a escala de tempo e τ_i é o tempo em que o estado f passa na faixa Δf .

A função densidade de probabilidade $p(f)$ pode, então, ser utilizada para computar os valores médios das propriedades do escoamento através da Equação:

$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 p(f) \phi_i(f) df \quad (3.28)$$

Os cálculos da PDF em tempo real tornariam a solução computacionalmente cara. Por este motivo, as integrais das PDFs são pré-processadas e armazenadas em tabelas que são consultadas durante a simulação. O pré-processamento e geração das tabelas de PDF exigem a utilização de *solvers* precursores para geração do modelo de cinética química. Basicamente, uma biblioteca química é constituída de um conjunto de informações que congrega taxas de reação, propriedades termoquímicas e dados de transporte. Para alguns combustíveis, como o gás natural e metanol, utilizados neste trabalho, já estão disponíveis na literatura pacotes de cinética química detalhada e simplificada, compatíveis com o ANSYS@ FluentTM.

A simulação da combustão de dois combustíveis diferentes utilizando a abordagem da fração de mistura só é possível no ANSYS@ FluentTM assumindo que todas as espécies estão reagindo no seu estado de equilíbrio. Essa simplificação faz com que as taxas de cada reação descritas nos pacotes cinéticos sejam ignoradas e uma única taxa de reação, calculada pela Equação (3.29), seja considerada para cada espécie, independentemente do número de passos do mecanismo completo.

$$R_i = \rho \frac{Y_i^{eq} - Y_i}{\tau_{car}} \quad (3.29)$$

onde o sobrescrito *eq* denota o equilíbrio químico e τ_{car} é o tempo característico da reação, calculado por:

$$\tau_{car} = \tau_{esc} + \tau_{quí} \quad (3.30)$$

onde τ_{esc} é o tempo característico do escoamento, calculado pelo modelo de turbulência e $\tau_{quí}$ é o tempo característico de reação da espécie *i*, calculado na Equação (3.31):

$$\tau_{qui} = c_{qui} \cdot \min\left(\frac{Y_i}{dY_i/dt}\right) \quad (3.31)$$

onde c_{qui} é uma constante cujo valor depende da espécie em questão. A função \min é utilizada para determinar o menor tempo de reação característico, que será escolhido dentre todas as espécies.

O modelo de equilíbrio químico pode levar a grandes erros pelo fato de ignorar as taxas de reação calculadas pelas equações de Arrhenius e assumir uma única taxa para cada espécie. Essa aproximação leva, geralmente, à temperaturas acima das estimadas em condição de não equilíbrio, por considerar as reações mais rápidas, com passo único, utilizando os menores tempos característicos do domínio [31]. Não obstante, a condição de equilíbrio será utilizada como alternativa para promover a ignição da chama e se obter uma solução inicial da combustão.

Sem utilizar o conceito de fração de mistura e PDFs, o ANSYS@ FluentTM pode modelar o termo R_i , responsável pela produção e consumo de cada espécie i devido a reações através de três abordagens diferentes: *Laminar Finite-Rate Model*, *Eddy Dissipation Model* (EDM) e *Eddy Dissipation Concept* (EDC). Esses três modelos fazem parte da *Generalized Finite-Rate Formulation*, adequada para um grande número de aplicações, incluindo sistemas de combustão laminar ou turbulenta, com e sem pré-mistura ou para chamas parcialmente pré-misturadas [31].

O *Laminar Finite-Rate Model* calcula a taxa de reação usando as equações de Arrhenius e ignora os efeitos das flutuações turbulentas. A taxa líquida de produção e consumo da espécie i através de reações é computada da soma de todas as reações envolvendo a referida espécie:

$$R_i = M_{M,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (3.32)$$

onde $M_{M,i}$ é a massa molecular da espécie i , N_R é o número de reações em que a espécie i participa e $\hat{R}_{i,r}$ é a taxa de reação molar da espécie i na reação r , calculada da seguinte forma:

$$\hat{R}_{i,r} = \Theta(v_{i,r}'' - v_{i,r}') \left(k_{d,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta_{j,r}'} - k_{i,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta_{j,r}''} \right) \quad (3.33)$$

onde,

N = número de espécies no domínio;

$v_{i,r}'$ = coeficiente estequiométrico do reagente i na reação r ;

$v_{i,r}''$ = coeficiente estequiométrico do produto i na reação r ;

$k_{d,r}$ = constante de taxa da reação direta r ;

$k_{i,r}$ = constante de taxa da reação inversa r ;

$C_{j,r}$ = concentração molar da espécie j na reação r ;

$\eta_{j,r}'$ = expoente de taxa para a espécie reagente j na reação r ;

$\eta_{j,r}''$ = expoente de taxa para a espécie produto j na reação r ;

Θ = efeitos de terceiro corpo;

A constante de taxa de reação direta $k_{d,r}$ é calculada através da expressão de Arrhenius:

$$k_{d,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT} \quad (3.34)$$

onde,

A_r = fator pré-exponencial para a reação r ;

β_r = expoente de temperatura para reação r ;

E_r = energia de ativação da reação r ;

R = constante universal dos gases;

Se a reação r é reversível, a constante de taxa de reação inversa $k_{i,r}$ é calculada da seguinte forma:

$$k_{i,r} = \frac{k_{d,r}}{K_r} \quad (3.35)$$

onde K_r é a constante de equilíbrio para a reação r .

O valores das constantes e expoentes nas equações (3.33), (3.34) e (3.35) variam de reação para reação e podem ser inseridos no código manualmente ou através dos pacotes cinéticos mencionados anteriormente.

Esse modelo é exato para chamas laminares, mas geralmente é impreciso para chamas turbulentas devido ao efeito de não linearidade causado pela turbulência na cinética química e desconsiderada no modelo [34].

No *Eddy Dissipation Model*, desenvolvido por MAGNUSSEN [34] as taxas de reação são controladas pela turbulência, de modo que os cálculos da cinética química de Arrhenius, custosos computacionalmente, podem ser evitados. Este modelo parte do pressuposto que a cinética envolvida no problema é rápida e as espécies reagem assim que misturadas. Dessa forma, a escala de tempo da cinética é desprezível se comparada à escala de tempo da turbulência, fazendo com que esta controle a taxa de combustão. A taxa de produção da espécie i através de reações químicas R_i , é calculada pelo menor valor das duas expressões abaixo:

$$R_i = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad (3.36)$$

$$R_i = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}} \quad (3.37)$$

onde:

Y_P = fração mássica dos produtos.

Y_R = fração mássica dos reagentes.

A = constante empírica igual à 4,0.

B = constante empírica igual à 0,5.

Nas equações. (3.36) e (3.37) as reações químicas são governadas pela escala de tempo de mistura k/ε e a combustão procede sempre que há turbulência ($k/\varepsilon > 0$). Os vórtices se dissipam a partir da mistura não queimada originando vórtices menores, sendo a taxa de dissipação de vórtices a responsável por estabelecer o ritmo da reação, considerando a taxa de reação química desprezível.

Por considerar a mesma taxa de reação turbulenta para todas as reações, o modelo EDM consome menos tempo de cálculo do que o *Finite Rate*, ao evitar a cinética química baseada nas taxas de Arrhenius. A taxa de reação única também pode levar a erros e só deve ser utilizada quando há certeza de que a escala de tempo da cinética é desprezível em relação a de turbulência (cinética rápida) e quando os modelos de cinética completa forem proibitivos em termos de processamento.

O modelo *Eddy Dissipation Concept* é uma extensão do *Eddy Dissipation Model*, também desenvolvido por MAGNUSSEN [35] para incluir mecanismos detalhados de reações químicas em escoamentos turbulentos. Ele assume que as reações ocorrem em pequenas estruturas turbulentas, chamadas escalas finas, onde os reagentes se misturam em escala molecular, numa temperatura suficientemente alta [36]. Essas estruturas são responsáveis também pela dissipação da turbulência em calor. O comprimento das escalas finas pode ser modelado como:

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \quad (3.38)$$

onde $*$ denota quantidades na escala fina e C_ξ é uma constante de fração volumétrica igual à 2,1377.

A fração volumétrica das escalas finas é calculada como ξ^{*3} . O ANSYS@FluentTM assume que a combustão nas escalas finas ocorre à pressão constante, com as espécies presentes e a temperatura no elemento tomadas como condições iniciais [31]. As reações procedem numa escala de tempo τ^* , governadas pelas equações de Arrhenius apresentadas no modelo *Finite Rate*. A escala de tempo τ^* é definida por:

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (3.39)$$

onde C_τ é uma constante igual à 0,4082.

Dentre os modelos que permitem a modelagem da combustão de dois combustíveis diferentes ao mesmo tempo sem a necessidade de assumir equilíbrio químico, o *Laminar Finite-Rate Model* é impreciso para chamas turbulentas, por não considerar os efeitos turbulentos nas reações. O *Eddy Dissipation Model* não resolve as equações de Arrhenius, considerando que a química é rápida e as taxas de reação são todas iguais, ditas pelas escalas de tempo de turbulência. O modelo *Eddy Dissipation Concept* é capaz de tratar a interação entre química e turbulência sem abrir mão dos mecanismos detalhados das reações e da influência das escalas de tempo da turbulência. O EDC é aplicável, sem a necessidade e mudança nos valores das constantes, em uma grande variedade de problemas de combustão, tanto nos casos de química rápida em relação aos tempos de mistura e de turbulência como nos casos em que as escalas da cinética são dominantes [37]. Este modelo foi utilizado no presente trabalho para modelar as reações de combustão simultâneas do gás natural e do metanol pelas razões apresentadas anteriormente e pelos resultados satisfatórios reportados pela literatura em simulação de equipamentos semelhantes [5, 8, 38].

3.2.5. Modelo de Radiação

Na fornalha de uma caldeira, a transferência de calor por radiação, bem como por convecção estão presentes. Porém, uma vez que a temperatura que os gases de combustão alcançam na reação são muito altas, a dependência na quarta ordem do fluxo de calor por radiação (Lei de Stefan-Boltzman) faz com que esta forma de transferência

seja predominante. Por esta razão, um modelo de radiação precisa ser bem definido para a simulação.

Basicamente, a proposta de modelagem da radiação térmica se concentra em obter o volume total de absorção e emissão de radiação térmica, Equação (3.40), a partir da solução da Equação de Transporte da Radiação (RTE) para a intensidade de radiação I e contabilizar sua participação como termo fonte na equação de transporte de energia (3.5).

$$S_r = -\nabla \cdot \mathbf{q}_r = a \int_0^{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) d\Omega - 4a\sigma T^4 \quad (3.40)$$

onde:

S_r = termo fonte de energia por radiação;

q_r = fluxo de calor por radiação;

a = coeficiente de absorção;

I = intensidade de radiação para a posição \mathbf{r} e direção \mathbf{s} ;

Ω = ângulo sólido;

σ = constante de Stefan-Boltzman.

O ANSYS@ FluentTM oferece cinco modelos de radiação diferentes: *Discrete Transfer Radiation Model* (DTRM), *P1*, *Rosseland*, *Surface-to-Surface* (S2S) e o modelo das ordenadas discretas (DO).

Antes de descrever os modelos disponíveis, se faz necessário tecer algumas considerações sobre pontos importantes ao se estudar a transferência de calor por radiação em uma simulação. A presença de elementos particulados (fuligem), por exemplo, afeta fortemente a radiação no escoamento, justamente por absorverem a mesma, assim tornando a temperatura mais elevada no meio. Na combustão completa de gases, pode-se considerar o meio isento de fuligem, assim, transparente à radiação. Essa consideração foi adotada para a descrição da radiação neste trabalho.

Para qualquer modelo utilizado para descrever a radiação, a intensidade do seu campo deve ser tratada como função do espectro, vinculando o escoamento dos gases quentes resultantes da combustão com o espectro da radiação. Uma das maneiras mais simples é aquela apresentada no modelo de corpo cinza, no qual a radiação é assumida uniforme através do espectro, sendo a mesma para todas as frequências. Uma alternativa a este modelo, é o Multi-Banda (*Non-Gray Model*), que utiliza um espectro dividido em N faixas espectrais de comprimento de onda finito. Cada faixa espectral é representada pelo valor do ponto médio da mesma no domínio da frequência, de modo que o parâmetro principal analisado neste modelo é o da frequência de radiação que depende do índice de refração do material. O modelo Multi-Banda é adequado para meios que possuam coeficientes de absorção que variam gradualmente através das bandas espectrais e suavemente nas mesmas, o que possibilita assumir que o coeficiente de dispersão seja constante em cada banda. Na presente dissertação não foi adotada essa abordagem. Em reações de combustão, o modelo Multi-Banda seria adequado em situações onde existe fuligem devido a interação desta com gases como CO₂, CO e H₂O(v), que absorvem e emitem radiação em diferentes números de onda.

Uma alternativa que busca uma relação de compromisso entre o modelo de corpo cinza e o completo Multi-Banda é o modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinza, ou WSGGM (*Weighted Sum of Gray Gases Model*). Desenvolvido por HOTTEL [14], WSGGM relaxa o comportamento descontínuo dos gases no espectro de radiação, aproximando-o como constante, cujo valor é a média ponderada pela temperatura dos valores das propriedades dos gases cinza fictícios no espectro dividido em N regiões.

O primeiro dos modelos oferecidos pelo ANSYS@ FluentTM, DTRM (*Discrete Transfer Radiation Model*), assume que toda a radiação que deixa a superfície de um elemento para um certo intervalo de ângulo sólido, pode ser aproximada para uma só faixa. O número de faixas é determinado previamente e o modelo resolve a equação de transferência por radiação para cada faixa [15]. Esse modelo é relativamente simples se comparado com os demais e de mais baixo custo computacional [31]. Porém, seu custo se torna mais elevado à medida que o número de faixas aumenta. Seus pontos negativos são: não permite incluir o efeito de espalhamento, ser aplicável somente para radiação cinza, não permitir processamento paralelo e ser bem mais caro computacionalmente que os demais para altas espessuras ópticas [31].

O modelo de radiação P1 é o caso mais simples do modelo geral PN, baseado na expansão da intensidade de radiação I em séries ortogonais de harmônicas esféricas [39, 40], considerando que a intensidade da radiação é independente da direção e isotrópica para uma dada posição do espaço. Consequentemente, o modelo resolve uma simples equação de difusão para a radiação incidente, cujo valor representa a soma de todas as intensidades radiantes em todas as direções. Trata-se de um modelo conservativo, indicado para meios participantes opticamente espessos, i.e., não é recomendado para casos de limites finos ou puramente transparentes [31]. O uso do modelo P1 é mais apropriado, no que se refere ao escopo de combustão, para o estudo de chamas de combustível pulverizados, na região da vizinhança imediata da chama [39, 40].

Pra modelagem de radiação cinza, a equação a seguir é obtida para o fluxo de calor por radiação q_r quando quatro termos da série são utilizados:

$$\mathbf{q}_r = -\frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G \quad (3.41)$$

onde σ_s é o coeficiente de espalhamento, G é a radiação incidente e C é o coeficiente linear anisotrópico da função de fase.

Com a introdução do seguinte parâmetro:

$$\Gamma = -\frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \quad (3.42)$$

a Equação (4.41) é simplificada para:

$$\mathbf{q}_r = -\Gamma \nabla G \quad (3.43)$$

A equação de transporte para G é:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - aG + 4an^2\sigma T^4 = S_G \quad (3.44)$$

onde n é o índice de refração do meio e S_G é uma fonte de radiação definida pelo usuário.

Combinando as equações (3.43) e (3.44):

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_r = aG - 4an^2\sigma T^4 \quad (3.45)$$

Lembrando da Equação (3.40), a expressão para $-\nabla \cdot \mathbf{q}_r$ pode ser diretamente substituída na equação de conservação da energia, Equação (3.5), como termo fonte para a radiação.

O modelo P1 também pode ser utilizado para modelar radiação não cinza utilizando o modelo de Multi-Banda. Neste este modelo, a Equação (3.44) é reescrita como:

$$\nabla \cdot (\Gamma_\lambda \nabla G_\lambda) - a_\lambda G_\lambda + 4a_\lambda n^2 \sigma T^4 = S_{G\lambda} \quad (3.46)$$

onde G_λ a radiação espectral incidente, a_λ é o coeficiente de absorção espectral, $S_{G\lambda}$ é o termo fonte definido pelo usuário. Introduzindo o parâmetro Γ_λ , definido como:

$$\Gamma_\lambda = \frac{1}{3(a_\lambda + \sigma_{s\lambda}) - C\sigma_{s\lambda}} \quad (3.47)$$

onde $\sigma_{s\lambda}$ é o coeficiente de espalhamento espectral, o fluxo de radiação espectral é calculado, então, como:

$$\mathbf{q}_\lambda = -\Gamma_\lambda \nabla G_\lambda \quad (3.48)$$

O termo fonte para a radiação a ser substituído na equação de conservação de energia é definido, então, como:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_r = \sum_{\substack{\text{Todas} \\ \text{as bandas}}} -\nabla \cdot \mathbf{q}_\lambda \quad (3.49)$$

O modelo P1 apresenta como vantagens: resolve as equações de difusão, que demandam menor esforço computacional; consegue modelar a radiação não cinza; e é facilmente aplicável à geometrias complicadas com coordenadas curvilíneas [31]. Este modelo é menos caro computacionalmente que o DO e o DTRM (para casos em que são necessárias várias faixas para o DTRM). Por outro lado, o modelo P1 tende a superestimar fluxos de radiação de fontes locais/concentradas ou sumidouros, e pode perder acurácia, a depender da complexidade da geometria, para baixas espessuras ópticas [31].

O modelo de Rosseland pode ser derivado do P1 com algumas aproximações. Assim como no P1, no Rosseland o fluxo de calor num meio cinza pode ser aproximado pela Equação (3.43), onde Γ também é definido pela Equação (3.42). Rosseland difere do P1 por assumir que a radiação incidente G é a de corpo negro para a temperatura do gás ao invés de resolver a equação de transporte (3.44). Assim:

$$G = 4\sigma n^2 T^4 \quad (3.50)$$

Substituindo o valor de G na Equação (3.43):

$$\mathbf{q}_r = -16\sigma\Gamma n^2 T^3 \nabla T \quad (3.51)$$

Utilizando a Equação (3.51) na (3.40), é possível calcular o termo fonte de radiação para uso na equação de transporte de energia.

O modelo de Rosseland possui características semelhantes ao P1, exceto pela vantagem de não resolver uma equação de transporte para a radiação incidente e, assim, ser mais rápido e consumir menos memória. Porém, ele só apresenta bons resultados para meios opticamente espessos, não sendo recomendado para meios transparentes. Além disso, esse modelo não considera radiação não cinza [31].

O modelo S2S foi desenvolvido para ser aplicado em simulações de transferência de calor por radiação em invólucros sem meio participante (sistemas de descarte de calor em espaçonaves e sistemas envolvendo radiação solar, por exemplo). A principal consideração feita nesse modelo é que qualquer absorção, emissão ou espalhamento podem ser ignorados, restando na análise somente a radiação “de parede para parede”, além de considerar as superfícies como cinzas e difusas. Por ser um modelo específico com bastantes simplificações, não se adequa ao problema físico deste trabalho.

O modelo das ordenadas discretas (DO do inglês, *Discrete Ordinates Radiation Model*), originalmente proposto por CHANDRASEKHAR [40] resolve a equação de transferência por radiação (RTE) para um número finito de ângulos sólidos discretos, cada um associado a um vetor direção s fixo no sistema global cartesiano e a um fator de peso w_i . Os fatores de peso são função do número de divisões do espaço, de modo que seu somatório seja igual a 4π . O modelo DO resolve equações de transporte similares àquelas relacionadas ao escoamento e à energia, mostrando-se um modelo suficientemente robusto para lidar com uma ampla faixa de problemas, na medida em que a RTE é resolvida nos volumes de controle pelo método de volumes finitos [40].

A equação de transferência de calor por radiação (RTE), para um meio com absorção, emissão e espalhamento é escrita como:

$$\frac{dI(\mathbf{r}, \mathbf{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\mathbf{r}, \mathbf{s}') \Phi(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}') d\Omega \quad (3.52)$$

onde Φ é a função de fase.

Depois de resolvida a Equação (3.52) para a intensidade de radiação I , através da Equação (3.40), o termo fonte de radiação para equação de conservação da energia é obtido:

$$S_r = a \sum_{i=1}^N w_i I(\mathbf{r}) - 4a\sigma T^4 \quad (3.53)$$

A intensidade da discretização do ângulo sólido é configurada pelo usuário, assim como a escolha do número de faixas no DTRM. Porém, diferente do DTRM, o modelo DO não realiza uma varredura nas faixas e sim transforma a RTE em uma equação de transporte para a intensidade de radiação em coordenadas espaciais. O modelo DO resolve as equações de transporte para todas as direções s . A quantidade de equações resolvidas pelo modelo equivale à quantidade de ângulos sólidos e de direções s utilizadas na discretização.

No *solver* ANSYS@ FluentTM, o modelo DO é implementado de duas maneiras: podendo estar acoplado ou não a equação de energia. No primeiro caso, as equações discretizadas de energia e intensidade de radiação são resolvidas de forma simultânea em cada célula [41], assumindo que as vizinhanças no espaço são conhecidas. Esta abordagem se mostra vantajosa em casos de elevada espessura óptica e/ou elevados coeficientes de dispersão, acelerando a convergência da solução [31] em relação àquela do método sequencial, a que, nos casos mencionados, a desacelera drasticamente. O contrário também se verifica. Para os casos de meio transparentes e de baixa espessura óptica o acoplamento energia/radiação prejudica a convergência. Não se contextualizando este trabalho na primeira situação, utilizou-se o método desacoplado [41, 42].

O modelo DO cobre toda a extensão de espessuras ópticas e pode ser aplicado tanto para problemas de radiação. Assim como P1 e Rosseland, DO também considera o espalhamento, como mostram as equações apresentadas.

Neste trabalho, se tem como enfoque a aplicação de combustíveis gasosos, gás natural e metanol, isentos de particulados, permitindo assim que o meio seja admitido como transparente. Além disso, considera-se que as paredes apresentam emissividade

total e não são catalíticas, ou seja, refletem toda a radiação recebida para o meio fluido e não afetam as reações. Nestas condições, dos modelos mencionados os mais adequados são o DTM, o P1 e o DO.

O modelo de radiação DO se mostra como a alternativa mais robusta na medida em que pode ser bem aplicado em superfícies com reflexão especular e em meios transparentes com dispersão anisotrópica, sendo aplicável para qualquer espessura óptica, ao contrário do modelo P1 que não é recomendável para meios transparentes com dispersão anisotrópica [31]. O custo computacional do modelo DO depende basicamente da discretização angular adotada, mostrando-se moderado para configurações típicas. O modelo DO é amplamente utilizado por pesquisadores que estudam a combustão em sistemas semelhantes [3, 5, 8].

3.2.6. Modelo de Escoamento Multifásico

O metanol é admitido no queimador no estado líquido e ar comprimido é utilizado para atomização. A primeira estratégia deste trabalho foi considerar o metanol em fase gasosa tanto no queimador quanto na fornalha em prol da simplificação do problema. Porém, para o metanol não havia disponíveis dados de medição da temperatura e pressão na entrada do queimador e para o ar de atomização não havia dados disponíveis de vazão. Por este motivo, foi realizada uma simulação do escoamento multifásico entre o metanol e o ar para se determinar as condições de entrada não disponíveis, bem como as condições de saída. Na simulação da fornalha, a simplificação do metanol na fase vapor foi aplicada, utilizando as condições de saída do queimador como condições de entrada. A seguir, são apresentados os modelos de escoamento multifásico avaliados para esta dissertação.

O primeiro passo para a modelagem adequada do escoamento multifásico é a determinação do tipo de regime do escoamento. O ANSYS® FluentTM agrupa os Escoamentos multifásicos em quatro categorias [31]:

- Fluxo em bolhas: bolhas discretas de gás ou líquido numa fase contínua líquida;
- Fluxo em gotas: gotas discretas de líquido em uma fase contínua gasosa;
- Fluxo em golfadas: grandes bolhas discretas numa fase líquida contínua;

- Fluxo estratificado / superfície livre: dois fluidos imiscíveis separados por uma claramente definida interface.

Para o caso em questão, a atomização do metanol líquido com ar comprimido pode ser melhor descrita na categoria de fluxo em gotas. Devido à falta de dados em relação à vazão de ar de atomização, não é sabido a priori qual a fração volumétrica ocupada pela fase líquida de metanol, porém espera-se que seja baixa em relação à do ar comprimido, característica do processo de atomização.

O avanço da dinâmica dos fluidos computacional levou ao desenvolvimento de duas abordagens para o cálculo numérico de escoamentos multifásico: Euler-Lagrange e Euler-Euler. A abordagem Euler-Lagrange, chamada no ANSYS® FluentTM de Modelo de Fase Discreta (*Discrete Phase Model*) trata uma fase como contínua, resolvendo as equações de conservação apresentadas no item 3.2.1, enquanto a outra fase, considerada dispersa, é tratada rastreando-se as partículas ou gotas, dispersas na fase contínua e resolvendo suas equações por meio de balanço de forças sobre elas [43]. É fundamental para esta abordagem que a fase dispersa esteja suficientemente diluída na fase contínua e possua uma baixa fração volumétrica, menor de que 10-12% para que os a interação partícula-partícula seja desprezível.

Na abordagem Euler-Euler as fases do escoamento são tratadas como meios contínuos interpenetrantes. Cada fase é modelada pelas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia e a interação entre fases ocorre por meio de termos de troca de quantidade de movimento [43]. As frações volumétricas são contínuas em função do espaço e do tempo e sua soma é igual a um.

Como mencionado anteriormente, para a abordagem Euler-Lagrange é fundamental que a fração volumétrica da fase diluída esteja abaixo de 10-12% e, como não há informação disponível sobre a vazão de ar comprimido, optou-se pela abordagem Euler-Euler para modelar a atomização, por ser capaz de modelar quaisquer faixas de fração volumétrica.

O solver do ANSYS® FluentTM oferece três modelos para descrever o escoamento multifásico segundo a abordagem Euler-Euler: Volume de Fluido (VOF do inglês *Volume of Fluid*), Modelo de Mistura e Modelo Euleriano.

O VOF é um modelo desenvolvido por NOH [44] para determinar e descrever a interface entre duas ou mais fases diferentes. Ele resolve um único grupo de equações

de conservação para as fases e rastreia a fração volumétrica de cada fluido ao longo do domínio. Aplicações típicas deste modelo incluem misturas imiscíveis com interface bem definida, movimento de grandes bolhas em um líquido e escoamentos de fluidos com superfícies livres, como enchimento / esvaziamento de reservatórios e escoamentos em canais. O modelo VOF se baseia na consideração de que as duas fases não são interpenetrantes [31] e, por esta razão, não se mostra adequado para o problema físico que se apresenta.

O Modelo de Mistura, desenvolvido inicialmente por ISHII [45], é um modelo que, assim como o VOF, utiliza a abordagem de fluido único, resolvendo as mesmas equações de conservação para ambas as fases, porém difere do antecessor pelo fato de viabilizar a interpenetração das fases, permitindo quaisquer valores de fração volumétrica além de 0 e 1 e aceitar que as fases escoem com velocidades diferentes, utilizando o conceito de velocidades de escorregamento ou velocidades relativas e de velocidades de deriva (*drift velocities*).

No Modelo de Mistura, as equações de conservação apresentadas no item 3.2.2 são resolvidas para todas as fases considerando as médias das propriedades ponderadas pela fração volumétrica:

(i) Equação de Conservação da Massa (Equação da Continuidade):

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = 0 \quad (3.54)$$

onde \mathbf{v}_m é a velocidade da mistura:

$$\mathbf{v}_m = \frac{\sum_{i=1}^N f_i \rho_i \mathbf{v}_i}{\rho_m} \quad (3.55)$$

e ρ_m é a massa específica da mistura:

$$\rho_m = \sum_{i=1}^N f_i \rho_i \quad (3.56)$$

(ii) Equação de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(f_i \rho_m \mathbf{v}_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m) = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \mathbf{v}_m + \nabla \mathbf{v}_m^T)] + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N f_i \rho_i \mathbf{v}_{dr,i} \mathbf{v}_{dr,i} \right) + \mathbf{S}_v \quad (3.57)$$

onde μ_m é a viscosidade da mistura:

$$\mu_m = \sum_{i=1}^N f_i \mu_i \quad (3.58)$$

e $\mathbf{v}_{dr,i}$ é a velocidade de deriva da fase i :

$$\mathbf{v}_{dr,i} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_m \quad (3.59)$$

e \mathbf{v}_i é a velocidade da fase i

A velocidade relativa ou de escorregamento é definida como a diferença entre as velocidades das fases e está relacionada com a velocidade de deriva da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_{dr,i} = \mathbf{v}_{ij} - \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{v}_{jk} \quad (3.60)$$

onde \mathbf{v}_{ij} é a velocidade relativa entre as fases i e j e Y_k é a fração mássica da fase k :

O ANSYS@ FluentTM faz uso de uma formulação algébrica para calcular a velocidade relativa desenvolvida por MAGNUSSEN [35]:

$$v_{ij} = \frac{\tau_i}{f_{arrasto}} \frac{(\rho_i - \rho_m)}{\rho_i} \mathbf{a} - \frac{\eta_t}{\sigma_t} \left(\frac{\nabla f_i}{f_i} - \frac{\nabla f_j}{f_j} \right) \quad (3.61)$$

onde σ_t é o número de Prandtl, η_t é a difusividade turbulenta e τ_i é tempo de relaxação da fase i :

$$\tau_i = \frac{\rho_i d_i^2}{18\mu_i} \quad (3.62)$$

d_i é o diâmetro das partículas (bolhas ou gotas) da fase i e a função de arrasto $f_{arrasto}$ é calculada de acordo com SCHILLER [46]:

$$f_{arrasto} = \begin{cases} 1 + 0.15 Re^{0,687} & Re \leq 1000 \\ 0,013 Re & Re > 1000 \end{cases} \quad (3.63)$$

A aceleração \mathbf{a} é calculada da seguinte forma:

$$\mathbf{a} = \mathbf{g} - (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m - \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} \quad (3.64)$$

(iii) Equação de Conservação da Energia:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^N (f_i \rho_i e_i) + \nabla \cdot \sum_{i=1}^N (f_i \rho_i e_i \mathbf{v}_i) = \nabla \cdot \left[\sum_{i=1}^N f_i (k_i + k_t) \nabla T_i \right] + S_{ei} \quad (3.65)$$

onde k_t é a condutividade térmica turbulenta e e é definida pela Equação (3.12).

O Modelo Euleriano é o mais completo e complexo modelo para escoamentos multifásicos oferecidos pelo ANSYS@ FluentTM. Ao contrário dos anteriores, ele resolve as equações de conservação para cada fase. O acoplamento é feito através de uma equação para a pressão e de coeficientes de trocas nas interfaces.

Quando um modelo multifásico completo, como o Euleriano, é utilizado, é preciso ajustar uma série de submodelos como o da concentração interfacial de área, da força de dispersão turbulenta, e do arrasto. Para que o modelo completo forneça resultados confiáveis é necessário que cada submodelo esteja bem configurado. Não obstante, o Modelo de Mistura, apresentado anteriormente, é um bom substituto para o modelo Euleriano para muitos casos [31], incluindo o de fase líquida dispersa numa fase gasosa, como o da atomização. Além disso, o Modelo de Mistura pode trabalhar tão bem como o completo, resolvendo um número menor de equações [47 48]. Por não ser o foco principal deste trabalho o estudo do escoamento multifásico e por apresentar resultados satisfatórios em trabalhos anteriores, o Modelo de Mistura foi utilizado no processo de atomização do metanol.

3.3. Modelagem dos Queimadores

A caldeira possui 12 queimadores de gás natural e 4 de metanol, totalizando 16 queimadores. Cada queimador possui características geométricas que demandaram um refinamento que resultou em malhas de centenas de milhares de elementos até malhas com mais de um milhão de elementos. A simulação de todos os queimadores juntos à fornalha resultaria em um custo computacional proibitivo para o trabalho. Para contornar essa dificuldade, levando em consideração que as vazões de combustíveis são divididas igualmente entre os queimadores, um queimador de gás natural e um queimador de metanol foram simulados e os perfis de velocidade, pressão e temperatura nas saídas foram importados como condições de contorno de entrada na fornalha.

Como as malhas nas saídas dos queimadores são diferentes das malhas nas entradas da fornalha, o ANSYS@ FluentTM realiza uma interpolação dos resultados quando os perfis são importados. Os perfis interpolados foram validados com os dados de saída dos queimadores, conforme descrito no capítulo 4, item 4.3. A seguir, é apresentado como cada queimador foi modelado.

3.3.1. Queimador de Gás Natural

Cada um dos 12 queimadores de gás natural recebe combustível do coletor através de uma única entrada. Após a admissão, o gás natural é distribuído, através de duas “pernas”, para dois bicos expansores com 11 furos cada. Através de cada furo, o combustível é inserido na fornalha para combustão com o ar. As Figuras 3.6 e 3.7 apresentam as dimensões do queimador.

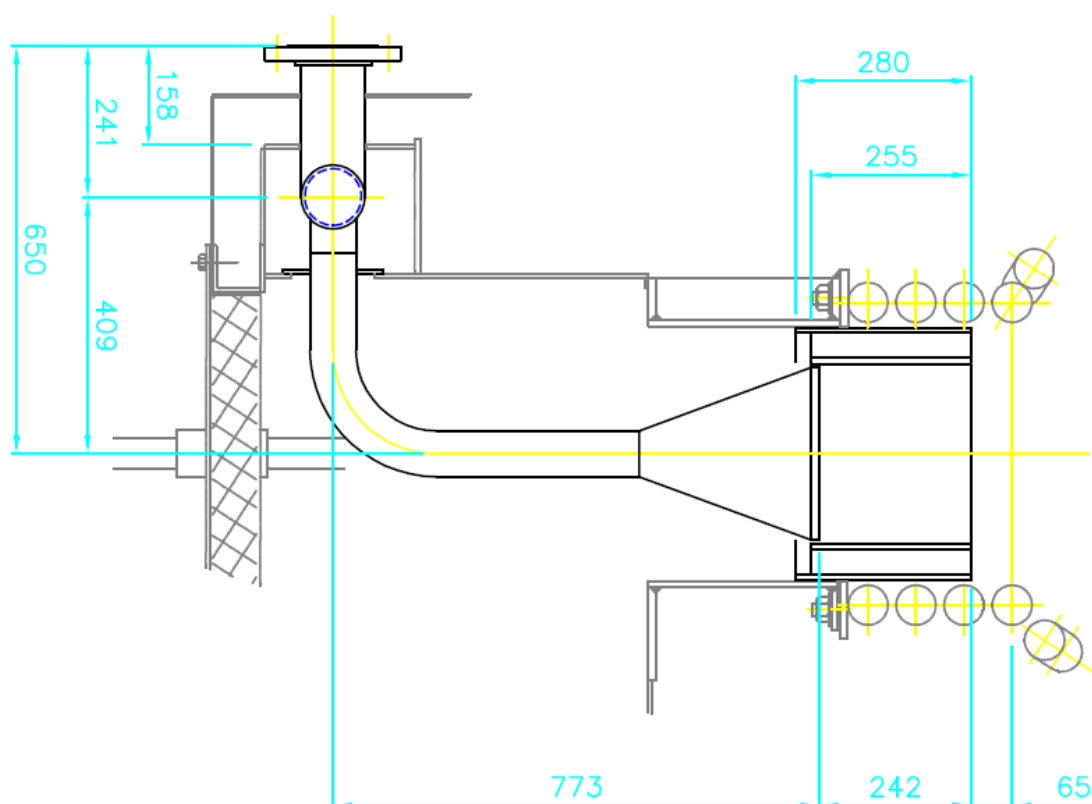


Figura 3. 6 - Queimador de gás natural. Dimensões em milímetros. Fonte: documentação técnica da caldeira.

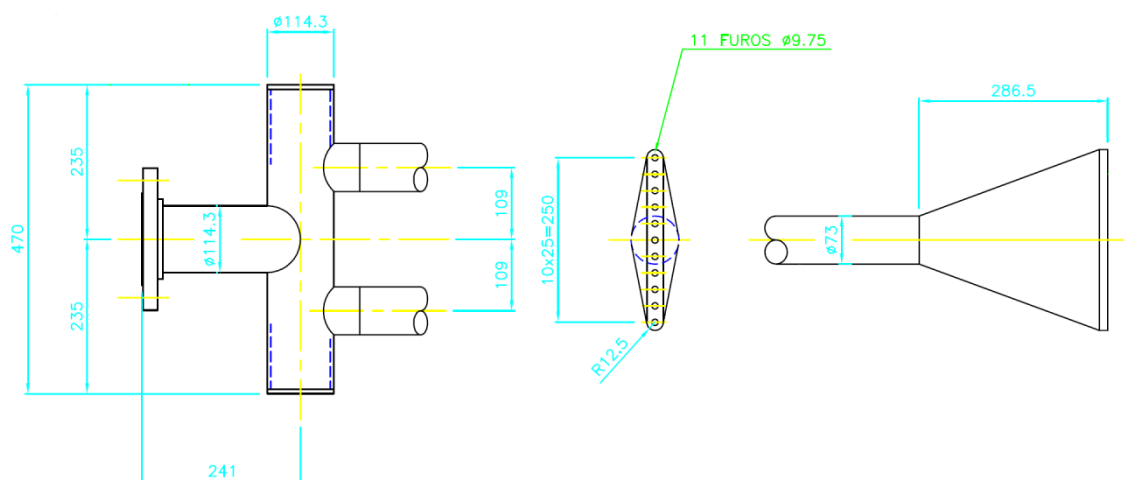


Figura 3. 7 - Detalhes da entrada e saída do queimador de gás natural. Dimensões em milímetros. Fonte: documentação técnica da caldeira.

A partir dos desenhos do queimador, seu modelo tridimensional foi criado utilizando o *software* ANSYS@ Design ModelerTM, conforme ilustra a Figura 3. 7.

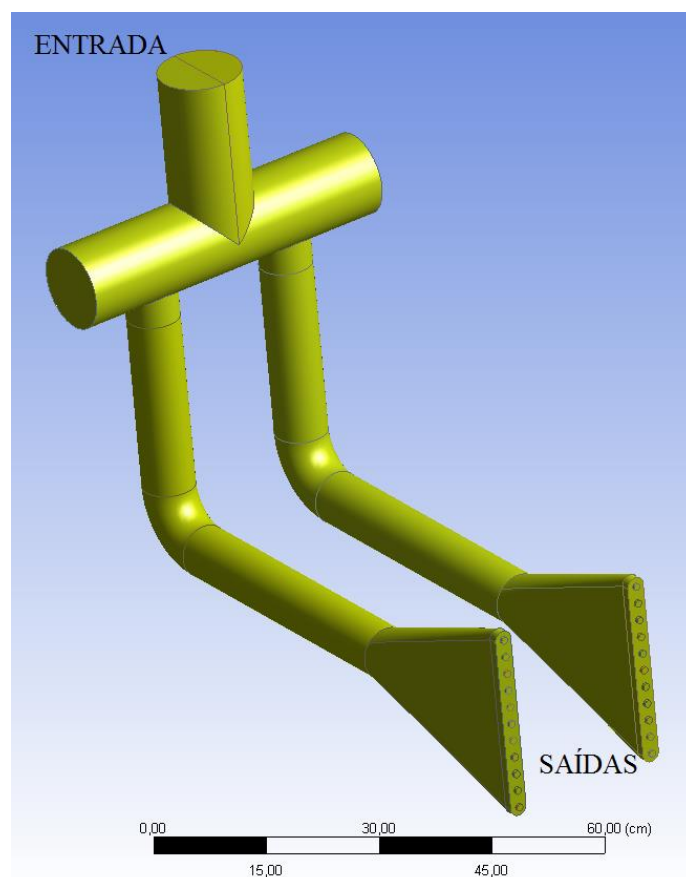


Figura 3. 8 – Modelo tridimensional do queimador de gás natural.

O software ANSYS@ Meshing™ foi utilizado para gerar as malhas do queimador, combinando elementos hexaédricos e tetraédricos. A técnica chamada *sweep meshing* foi utilizada sempre que possível para criar os elementos hexaédricos, por conseguir cobrir o domínio com um número menor de elementos e gerar malhas de maior qualidade ortogonal, na maioria dos casos. Além disso, o uso dos elementos hexaédricos permite que grande parte da malha fique alinhada ao sistema cartesiano e ao sentido do escoamento, reduzindo os erros numéricos. Onde não foi possível lançar mão do *sweep meshing* (nos expansores, por exemplo), elementos tetraédricos foram criados. Estes elementos possuem a vantagem de se adaptar melhor a geometrias mais complexas e não lineares. Nas regiões junto às paredes, uma fina camada de elementos prismáticos foi criada para capturar os altos gradientes e efeitos da camada limite. Foram utilizadas de 12 a 16 camadas, com as camadas mais próximas às paredes tendo de 0,003 a 0,02 mm de altura, de forma a garantir o valor máximo de 1 para o y^+ . A figura 3.9 mostra a malha escolhida para a modelagem do queimador de gás natural após o estudo de convergência de malha (os resultados deste estudo são apresentados no item 4.2).

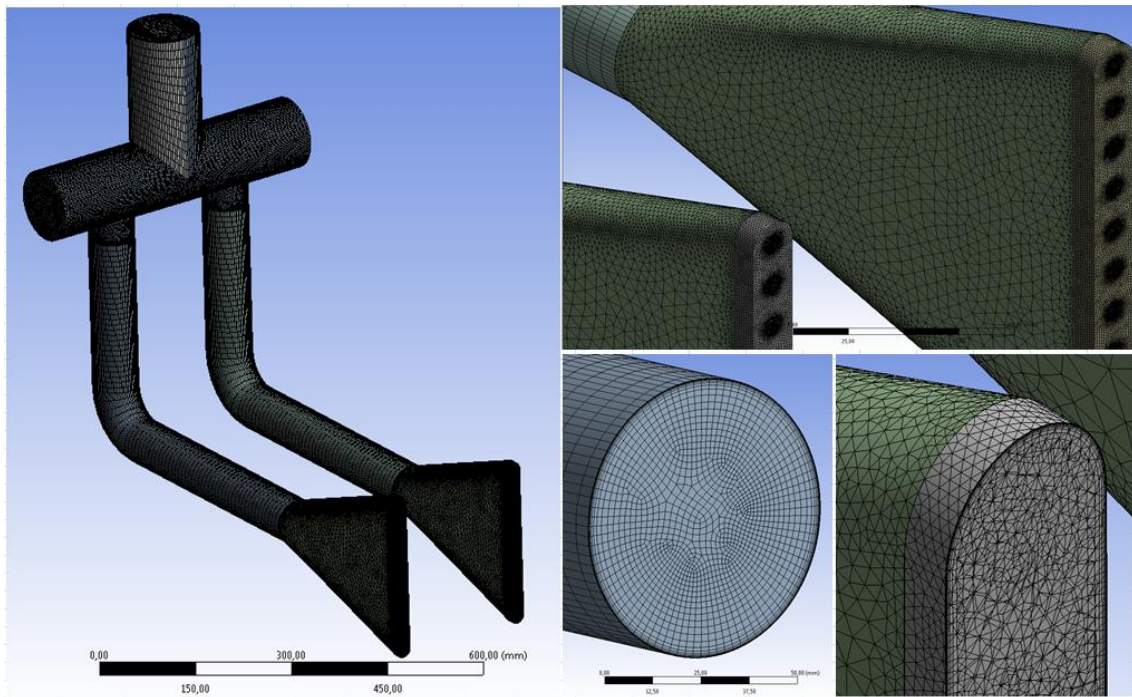


Figura 3. 9 – Malha utilizada no queimador de gás natural com destaque para as camadas de prismas nas paredes.

Como condições de contorno, na entrada foi adotada vazão prescrita normal à face, não escorregamento e fluxo de calor nulo nas paredes, e pressão prescrita nas saídas. A Tabela 3. 3 apresenta as condições de contorno.

Tabela 3. 3 – Condições de contorno para o queimador de gás natural.

Região	Condição	Vazão (kg/s)	Press. (kPa g)	Temp. (°C)
Entrada	Vazão prescrita normal na entrada	0,33	52,73	12,40
Paredes	Não escorregamento fluxo de calor nulo	-	-	-
Saída	Pressão prescrita	-	2,45	-

3.3.2. Queimador de Metanol

O queimador de metanol foi dividido em duas partes: placa misturadora e bico de queima. A primeira recebe o ar de atomização através de seus 18 furos e o encaminha ao bico. Este recebe o ar da placa por 6 furos e o metanol da lança pelo centro. No bico é feita a mistura ar de atomização/metanol através de seis canais internos. Após a atomização, o metanol é admitido na fornalha através dos seis furos do bico do queimador. A Figura 3. 10 mostra as dimensões da placa e do bico.

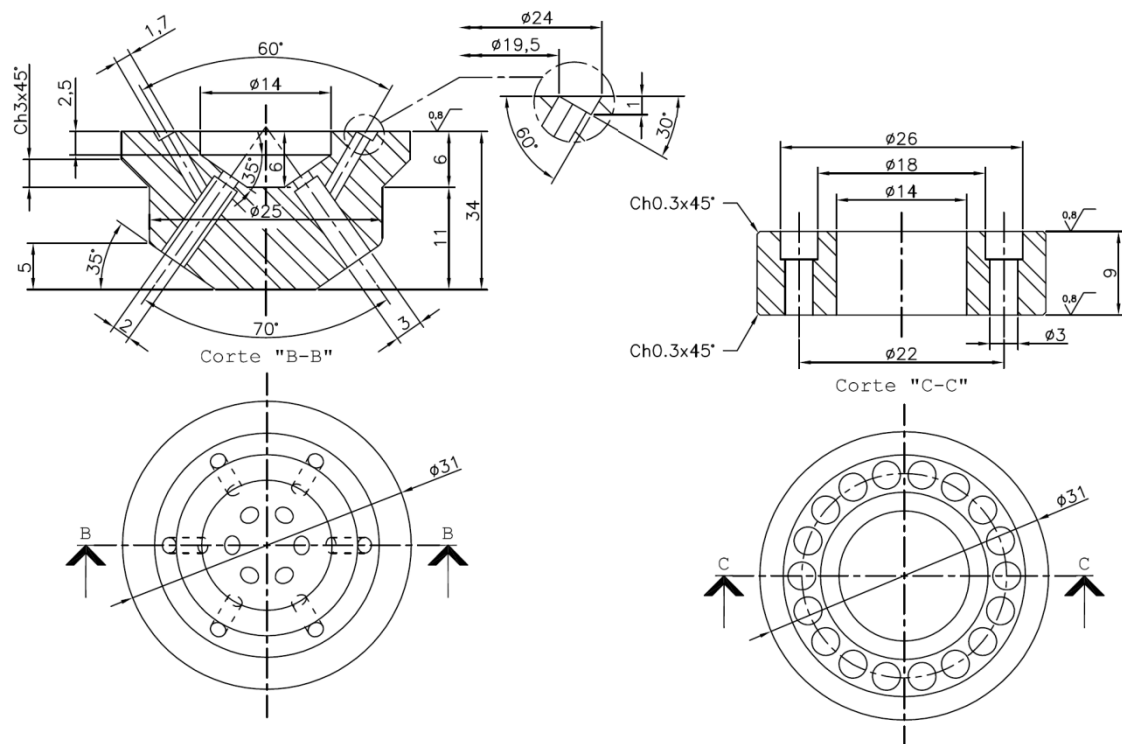


Figura 3. 10 – Dimensões do bico (esquerda) e da placa (direita) do queimador de metanol. Dimensões em milímetros. Fonte: documentação técnica da caldeira.

A partir dos desenhos do queimador, seu modelo tridimensional foi criado utilizando o *software* ANSYS@ Design Modeler™, conforme ilustra a Figura 3. 11. Do modelo tridimensional, a região fluida (interior da placa e do bico) foi “retirada” para a simulação (Figura 3. 12). Em função da simetria apresentada, foi simulado 1/6 do queimador (Figura 3. 13).

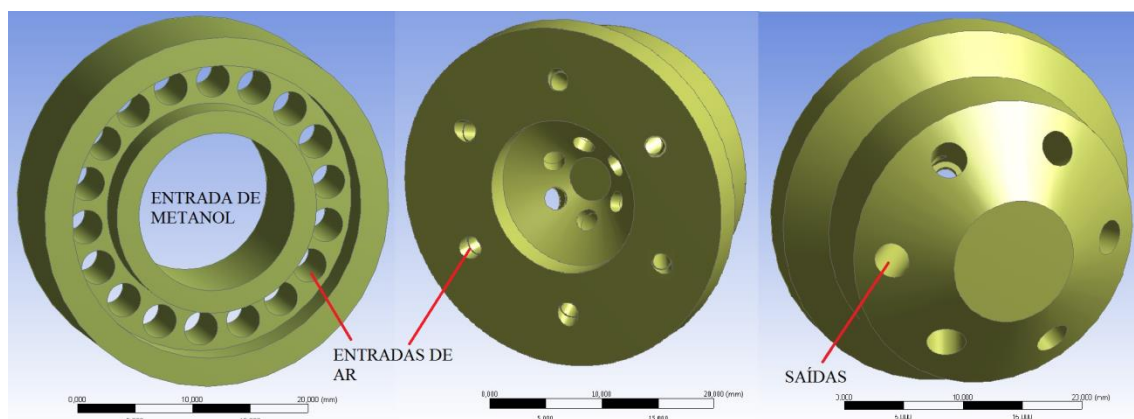


Figura 3. 11 – Modelo tridimensional da placa e do bico do queimador de metanol.

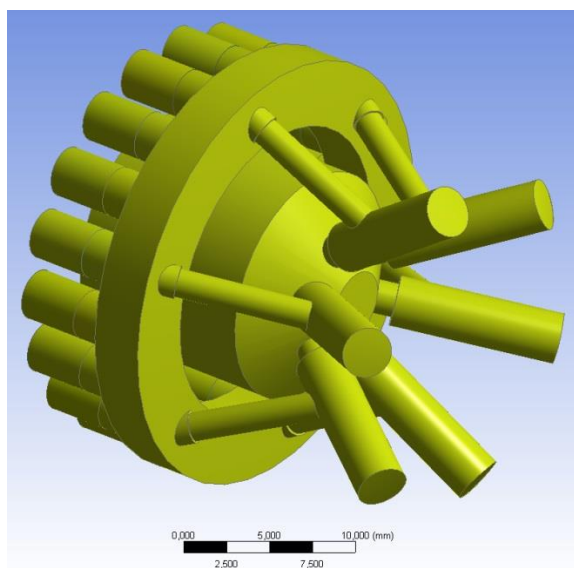


Figura 3. 12 – Região de fluido do queimador de metanol.

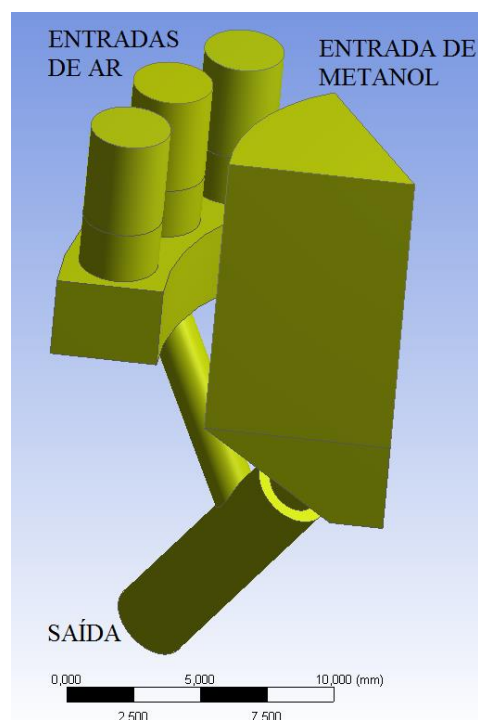


Figura 3. 13 – Parte do queimador que foi simulada (simetria).

As malhas do queimador de metano também foram criadas utilizando o *software* ANSYS@ MeshingTM, combinando elementos hexaédricos e tetraédricos. Nas regiões junto às paredes, foram utilizadas 16 camadas de elementos prismáticos, com as camadas mais próximas às paredes tendo 0,0012 mm de altura, de forma a garantir o valor máximo de 1 para o y^+ . A Figura 3. 14 mostra a malha escolhida para a modelagem do queimador de metanol após o estudo de convergência de malha (os resultados deste estudo são apresentados no item 4.2).

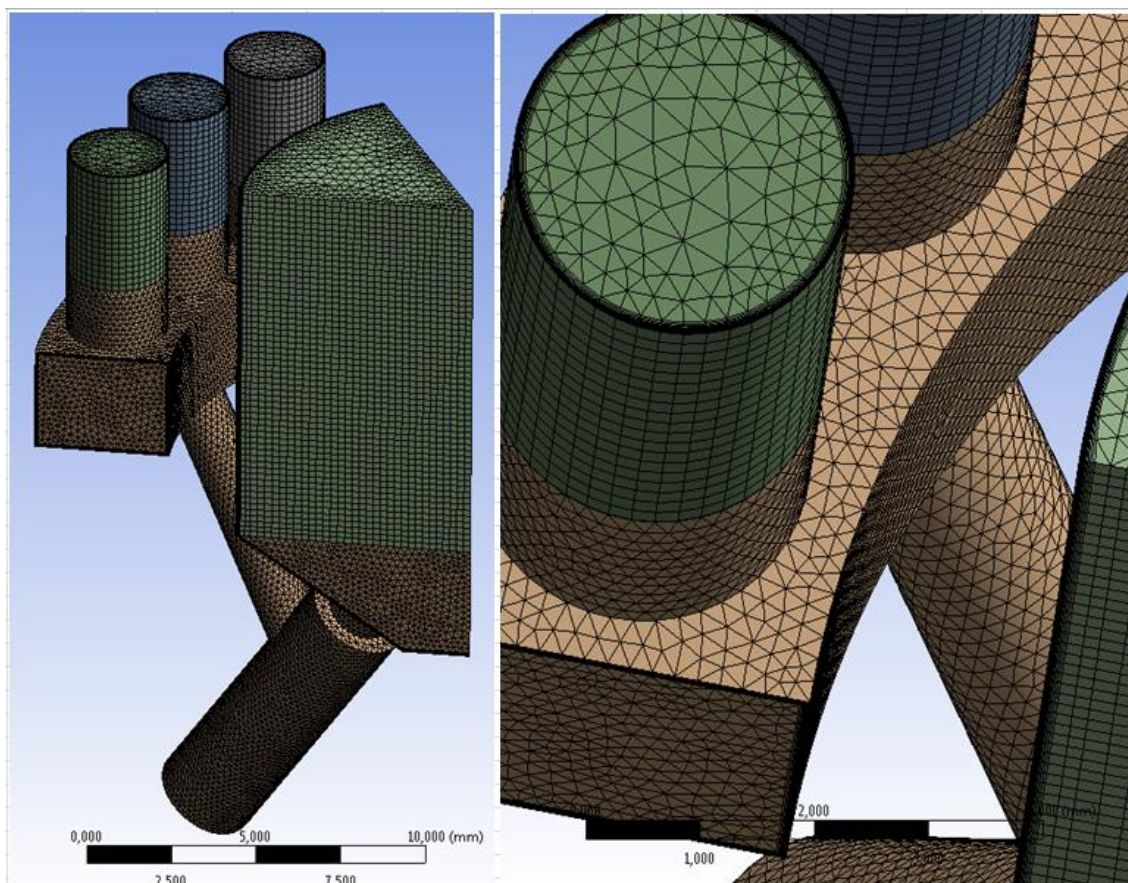


Figura 3. 14 – Malha utilizada no queimador de metanol com destaque para as camadas de prismas nas paredes.

Pelo fato do queimador admitir metanol líquido e ar de atomização, e por não haver disponíveis informações de pressão e temperatura do metanol e de vazão do ar de atomização na entrada do queimador, foi realizada uma simulação do escoamento multifásico para se determinar as condições de entrada do metanol. Devido à ação do ar comprimido, o metanol entra na caldeira em pequenas partículas misturadas ao ar. Dessa maneira, o metanol foi modelado como vapor no interior da fornalha para evitar uma abordagem multifásica do escoamento dentro desta, o que tornaria a simulação impraticável devido ao alto custo computacional. Assim como no caso do gás natural, as condições de saída do queimador de metanol foram utilizadas como condições de entrada na fornalha.

Na entrada de metanol deste queimador foi adotada vazão prescrita normal à face como condição de entrada. Na entrada de ar, pressão prescrita e escoamento normal. Nas paredes, condição de não escorregamento e fluxo de calor nulo e pressão prescrita na saída. A Tabela 3. 4 apresenta as condições de contorno.

Tabela 3. 4 – Condições de contorno para o queimador de metanol.

Região	Fluido	Condição	Vazão (kg/s)	Press. (kPa g)	Temp. (°C)
Entrada	Metanol	Vazão prescrita normal na entrada	0,024	-	-
	Ar de atomização	Pressão prescrita normal na entrada	-	584,96	26,30
Paredes	-	Não escorregamento fluxo de calor nulo	-	-	-
Saída	-	Pressão prescrita	-	2,45	-

3.3.3. Difusor de Ar Primário

O ar primário do queimador de metanol é admitido na caldeira através do difusor, responsável por propiciar a devida mistura do ar com a corrente de metanol atomizado. A Figura 3. 15 apresenta o difusor com suas dimensões.

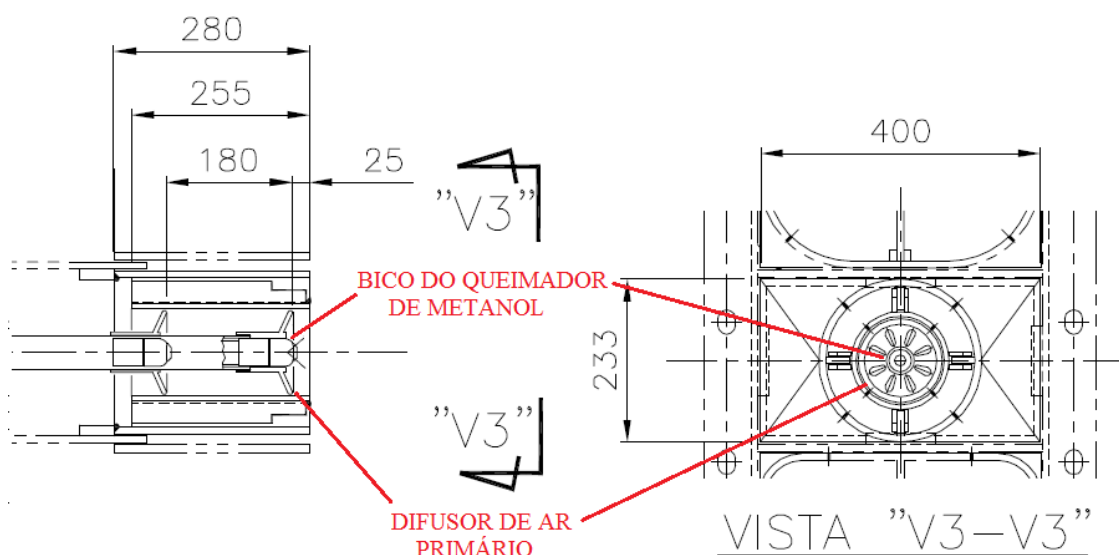


Figura 3. 15 – Difusor de ar primário do queimador de metanol e suas dimensões, em milímetros. Fonte: documentação técnica da caldeira.

A partir dos desenhos do difusor, seu modelo tridimensional foi criado utilizando o *software* ANSYS@ DesignModeler™, conforme ilustra a Figura 3. 16. Do

modelo tridimensional, a região fluida (interior difusor) foi “retirada” para a simulação (Figura 3. 17). Em função da simetria apresentada, foi simulado 1/8 do difusor (Figura 3. 18)

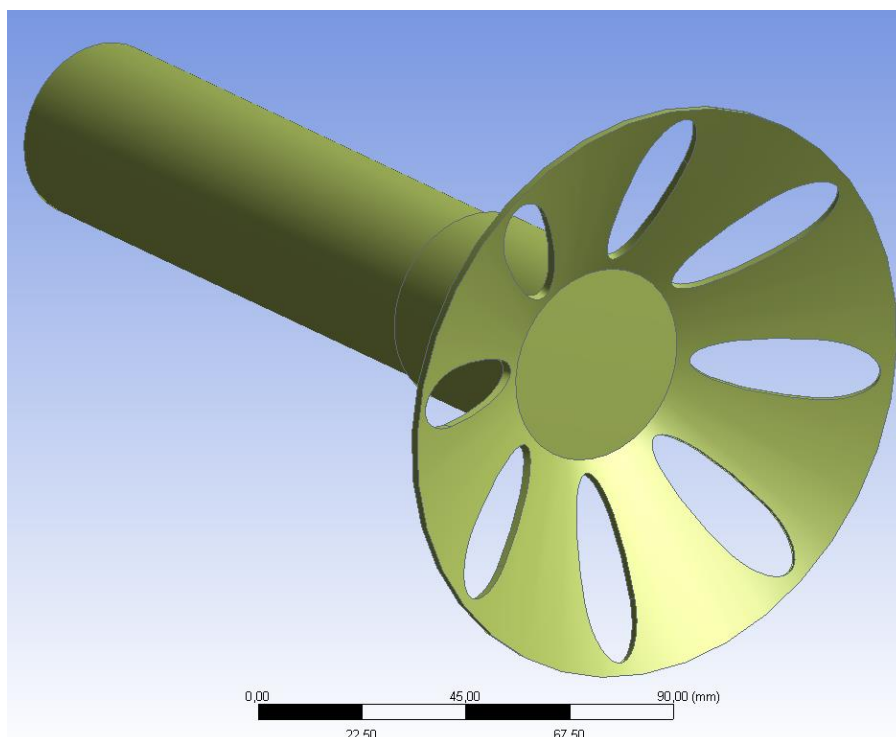


Figura 3. 16 – Modelo tridimensional do difusor de ar primário do queimador de metanol.

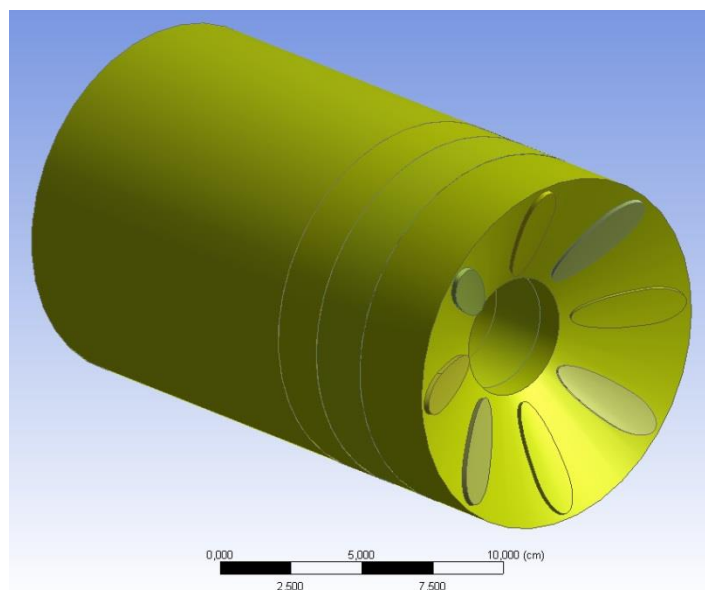


Figura 3. 17 – Região de fluido do difusor de ar primário do queimador de metanol.

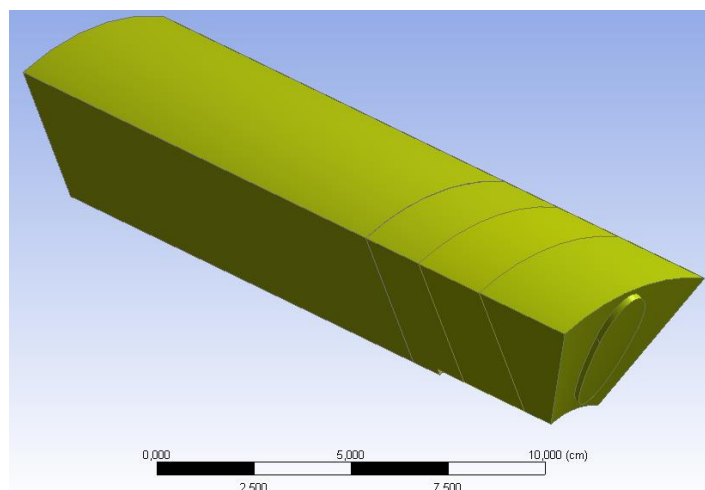


Figura 3. 18 – Parte do difusor de ar primário do queimador de metanol (simetria).

Para o difusor, as malhas foram criadas também utilizando o *software* ANSYS@ MeshingTM, combinando elementos hexaédricos e tetraédricos. Nas regiões junto às paredes, foram utilizadas 14 camadas de elementos prismáticos, com as camadas mais próximas às paredes tendo 0,0025 mm de altura, de forma a garantir o valor máximo de 1 para o y^+ . A Figura 3. 19 mostra a malha escolhida para a modelagem do queimador de metanol após o estudo de convergência de malha (os resultados deste estudo são apresentados no item 4.2).

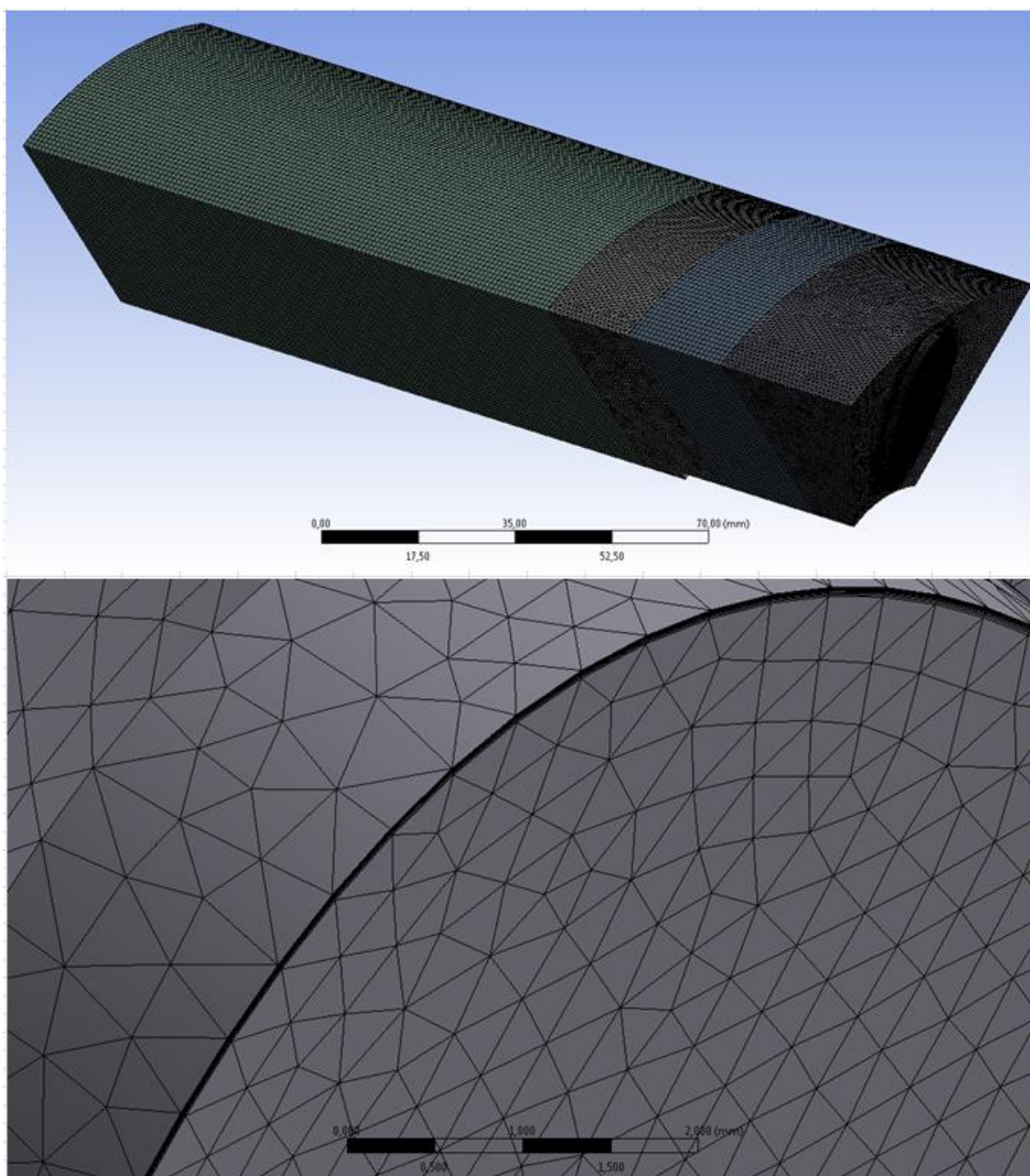


Figura 3. 19 – Malha utilizada no difusor de ar primário do queimador de metanol com destaque para as camadas de prismas nas paredes.

Como condições de contorno, na entrada foi adotada vazão prescrita normal à face, não escorregamento e fluxo de calor nulo nas paredes, e pressão prescrita nas saídas. A Tabela 3. 5 apresenta as condições de contorno.

Tabela 3. 5 – Condições de contorno para o difusor de ar primário do queimador de metanol.

Região	Condição	Vazão (kg/s)	Press. (kPa g)	Temp. (°C)
Entrada	Vazão prescrita normal na entrada	0,12	3,23	147,94
Paredes	Não escorregamento fluxo de calor nulo	-	-	-
Saída	Pressão prescrita	-	2,45	-

3.4. Fornalha

A fornalha representa a parte mais importante de uma caldeira, onde os combustíveis se misturam com ar e as reações de combustão ocorrem. Nessa região os gases gerados pela combustão atingem as maiores temperaturas da caldeira e transferem calor por radiação e convecção aos tubos que formam as “paredes” da fornalha. São nesses tubos que o processo de vaporização da água começa. A geometria e as dimensões da fornalha são desenvolvidas de acordo com os combustíveis que serão queimados e os níveis do vapor produzido, fatores estes que influenciam fortemente o tipo de combustão gerada. Em um estudo de CFD é de extrema importância que a fornalha seja modelada da maneira mais fiel possível ao equipamento original, tanto em relação aos seus aspectos geométricos quanto aos modelos físicos e condições de contorno empregadas.

Na Figura 3. 3 é possível identificar, no interior da caldeira, a região da fornalha que foi modelada, em azul, com destaque em vermelho dos queimadores e da saída do domínio. Logo em seguida, a Figura 3. 4 apresenta as dimensões da fornalha. A partir dos desenhos da fornalha, seu modelo tridimensional foi criado utilizando o *software* ANSYS@ DesignModelerTM, conforme ilustra a Figura 3. 20, com destaque para as entradas dos combustíveis.

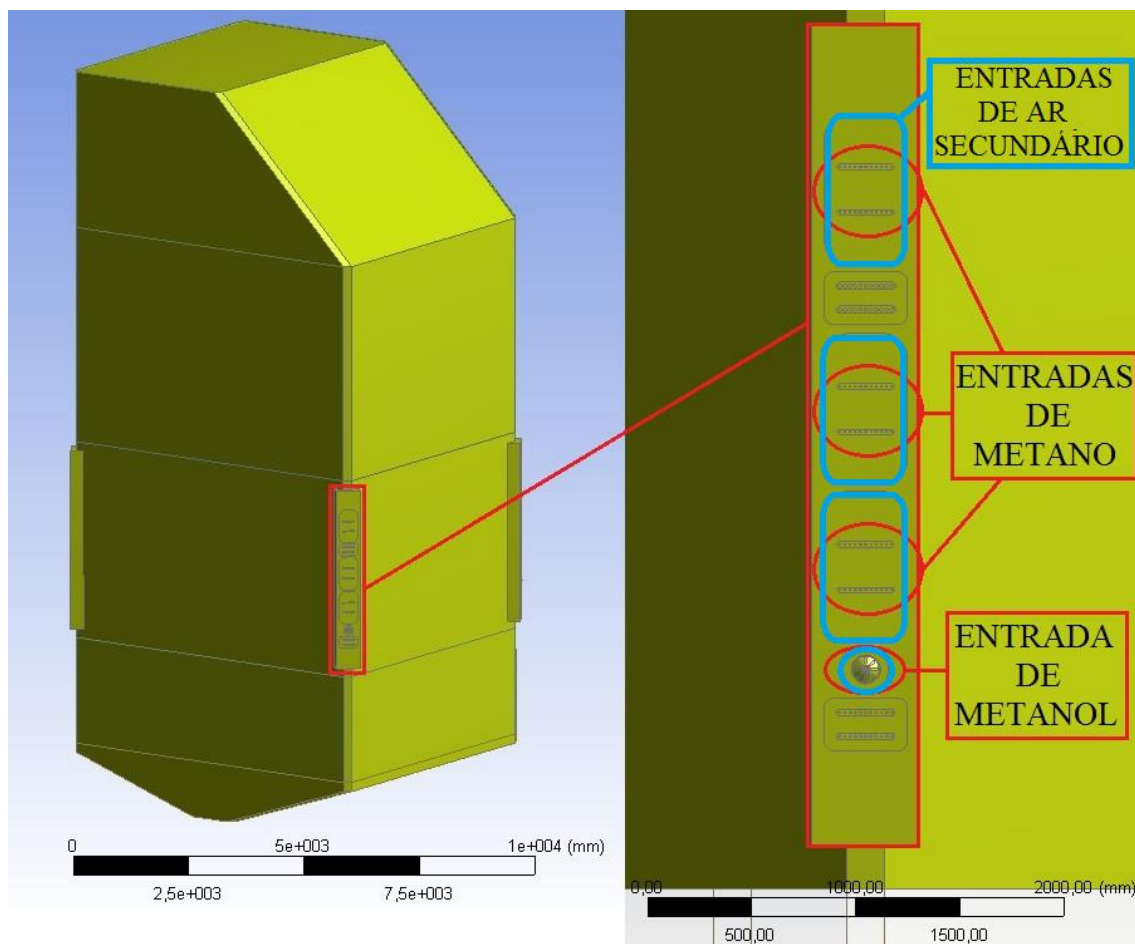


Figura 3. 20 – Modelo tridimensional da fornalha com destaque para as entradas de combustíveis e de ar secundário.

As malhas da fornalha também foram criadas utilizando o *software* ANSYS@ Meshing™, combinando elementos hexaédricos e tetraédricos. Nas regiões junto às paredes, foram utilizadas de 10 a 12 camadas, com as camadas mais próximas às paredes tendo de 0,025 a 0,1 mm de altura, de forma a garantir o valor máximo de 1 para o y^+ . A figura 3.21 mostra a malha escolhida para a modelagem da fornalha após o estudo de convergência de malha (os resultados deste estudo são apresentados no item 4.2).

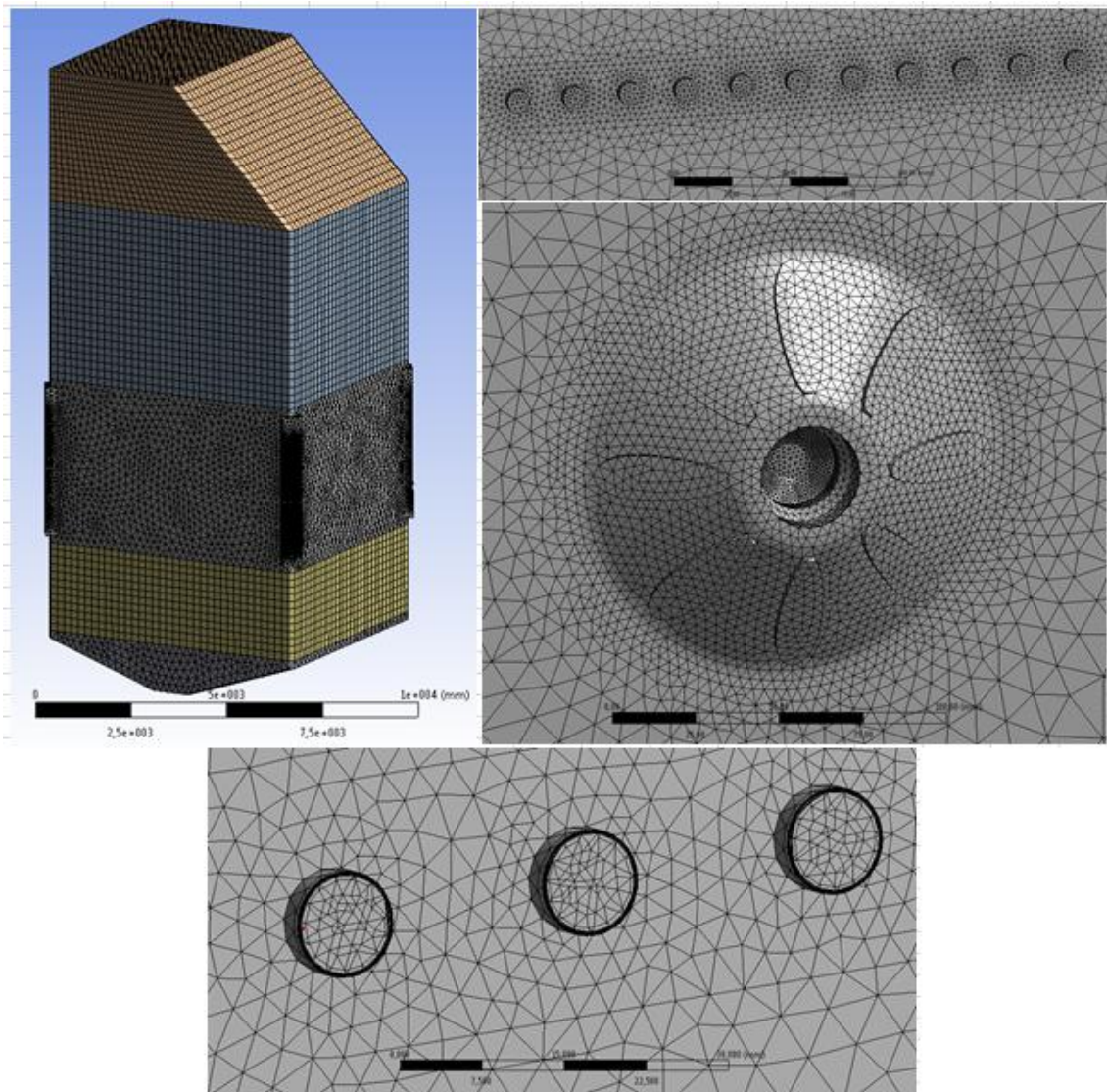


Figura 3. 21– Malha utilizada na fornalha com destaque para as entradas de combustíveis e para as camadas de prismas nas paredes.

Os perfis de velocidade, pressão e temperatura das correntes de combustíveis e de ar primário foram importados das simulações dos queimadores como condições de contorno de entrada na fornalha. Já para o ar de combustão secundário, a condição de entrada escolhida é de vazão prescrita normal. As paredes da fornalha foram modeladas como paredes lisas de aço carbono com espessura de quatro milímetros com uma camada de magnetita no lado externo de um milímetro [49] para levar em consideração a exposição do aço à água. As propriedades térmicas do aço foram obtidas do banco de dados do ANSYS@ FluentTM e a camada de óxido foi caracterizada conforme os trabalhos de EDGAR [50] e NODA [51]. Com o intuito de simular o fluxo de calor transferido à água nos tubos foi adotada uma condição de contorno térmica do terceiro

tipo, convecção com um coeficiente de troca térmica igual a $30.000 \text{ W/K} \cdot \text{m}^2$ [52] e temperatura de corrente livre de $307,25^\circ\text{C}$ (temperatura de saturação para a pressão de trabalho da caldeira, 95 bar). Nas paredes também foi utilizada condição de contorno de não escorregamento. Na saída foi adotada a condição de pressão prescrita. A Tabela 3. 6 sumariza as condições de contorno.

Tabela 3. 6 – Condições de contorno para a fornalha.

Região	Fluido	Condição	Vazão (kg/s)	Press. (kPa g)	Temp. ($^\circ\text{C}$)
Entrada	Gás natural	Perfis de saída do queimador importados	-	-	-
	Metanol + ar de atomização	Perfis de saída do queimador importados	-	-	-
	Ar de combustão primário	Perfis de saída do queimador importados	-	-	-
	Ar de combustão secundário	Vazão prescrita normal na entrada	76,76	3,22	147,85
Paredes	-	Não escorregamento	-	-	-
	-	Fluxo de calor por convecção	-	-	-
Saída	-	Pressão prescrita	-	0,62	-

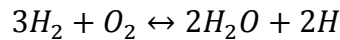
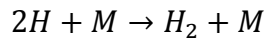
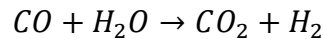
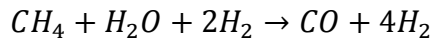
Dos modelos físicos empregados nas simulações, para a modelagem da turbulência, foi utilizado o modelo SST $k - w$, adotando-se correções para a curvatura e de baixo Re.

A combustão foi descrita pelo modelo *Eddy Dissipation Concept* (EDC). Originalmente, neste trabalho foi utilizado o pacote cinético e termoquímico GRI-Mech 3.0 [53] para descrever a cinética química do gás natural e o pacote elaborado por HELD [54] para o metanol. O pacote GRI-Mech foi especificamente projetado para a descrição da combustão do metano e etano, tendo sido um produto de um time de especialistas em cinética suportado pelo *Gas Research Institute* (GRI), organização criada para pesquisar aplicações para o gás natural. O pacote desenvolvido por HELD

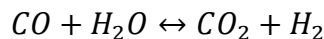
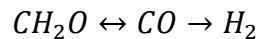
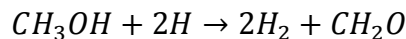
[54] é o mais completo mecanismo cinético do metanol encontrado na literatura. Ambos os mecanismos se apresentam em um formato compatível com o ANSYS@ FluentTM e estão disponíveis para a comunidade científica sem custos, tendo sido amplamente testados em variados casos, o que os configurou como padrões industriais para a comunidade de pesquisa [55]. Porém, devido à elevada complexidade dos pacotes completos, com um total de 325 reações e 53 espécies para o gás natural e 89 reações e 22 espécies para o metanol; ao modelo EDC que calcula as equações de Arrhenius para cada reação e à malha da fornalha que possui um número elevado de elementos (pouco mais de quatro milhões), tornou-se impraticável a utilização destes mecanismos em função do altíssimo custo computacional.

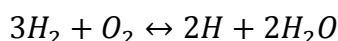
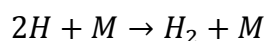
Para tornar factível a modelagem da combustão de duas correntes de combustíveis diferentes (gás natural e metanol) em tempo aceitável com os recursos computacionais disponíveis, foi utilizado o modelo de combustão EDC com os pacotes de cinética química reduzida do metano desenvolvido por BILGER [56] e do metanol desenvolvido por YALAMANCHILI [57]. O primeiro possui quatro reações e o segundo possui cinco, apresentadas a seguir:

(i) Mecanismo reduzido do metano [56]:



(ii) Mecanismo reduzido do metanol [57]:





Como os mecanismos reduzidos não incluem todas as espécies das composições do gás natural e do metanol, as frações molares dessas espécies, 0,086 no total para o gás natural e 0,0116 para o metanol, foram contabilizadas como do metano e do metanol, respectivamente, gerando as seguintes composições para a simulação:

Tabela 3. 7 - Composição do gás natural para a simulação.

Componente	Fração molar
Metano	0,9772
Nitrogênio	0,0157
Dióxido de Carbono	0,007
Oxigênio	0,0001

Tabela 3. 8 - Composição da corrente de metanol para a simulação.

Componente	Fração molar
Metanol	0,9616
Água	0,0384

Estes mecanismos reduzidos foram validados utilizando dados experimentais e dados de simulação com o mecanismo completo GRI-Mech 3.0 e o desenvolvido por HELD [56], conforme descrito no capítulo 4, item 4.1.

Como modelo de radiação foi adotado o modelo das ordenadas discretas (DO), com quatro divisões dos ângulos *theta* e *phi*, conforme o trabalho de DIAS [10] e discretização de 3x3 pixels conforme indicado para meios transparentes e semitransparentes [21].

O regime do escoamento simulado na fornalha foi permanente. Como estratégia de resolução numérica das equações, o método numérico baseado na pressão (*Pressure-based Solver*) foi utilizado por ser mais adequado para escoamentos incompressíveis de baixa velocidade [15], As equações de conservação da quantidade de movimento e da continuidade foram resolvidas simultaneamente utilizando o esquema acoplado (*Coupled Algorithm*). Este esquema, por resolver de forma implícita

as referidas equações, geralmente oferece maior estabilidade e velocidade de convergência para a solução [15]. Os gradientes foram calculados pelo método dos quadrados mínimos (*Least Squares Cell Based*). Este método, dos três oferecidos pelo ANSYS@ FluentTM, apresenta a maior acurácia, junto com o método baseado nos nós (*Node-Based*), porém é menos caro computacionalmente [15]. Durante o início dos cálculos, a discretização espacial dos termos advectivos das equações foi executada através do esquema de segunda ordem para todas as variáveis com exceção das quantidades turbulentas, nas quais se aplicou o esquema de primeira ordem para manter a estabilidade. Depois da primeira solução convergida, a discretização de segunda ordem também foi realizada nas equações do modelo de turbulência para melhorar a acurácia da solução. A técnica pseudo transiente foi utilizada como forma de relaxação implícita das equações da continuidade e de conservação da quantidade de movimento (fator 0,5 para cada), da energia cinética turbulenta, da taxa de dissipação turbulenta, das espécies e da energia (fator de 0,75 para cada). Foram aplicados fatores de escala de tempo de 25 para as equações das espécies e da energia para acelerar as reações. Tais fatores foram reduzidos até o valor unitário a medida que a solução avançou e convergiu para aumentar a acurácia. Todos os casos simulados foram inicializados pelo método híbrido, no qual os valores das condições de contorno são interpoladas para calcular os valores iniciais da solução.

Para as propriedades físicas dos gases foi implementada uma dependência térmica de modo a aumentar a precisão dos resultados, particularmente em situações de alta velocidade (entrada dos combustíveis na fornalha). Dessa forma, os coeficientes dos polinômios adotados para o perfil da condutividade térmica e viscosidade em termos de temperatura para a mistura foram considerados, respectivamente, como 7.6736×10^{-3} e $5,8837 \times 10^{-5}$, e $7,6181 \times 10^{-6}$ e $3,26223 \times 10^{-8}$ [21]. Para a massa específica foi utilizado o modelo de gás ideal incompressível. O calor específico (c_p) da mistura foi definido como dependente da composição (*mixing-law*), permitindo que cada espécie tenha seu c_p calculado de forma individual e o calor específico da mistura seja ponderado em termos de cada fração molar. Cada espécie teve seu c_p modelado em função da temperatura com os coeficientes dos polinômios escolhidos conforme a base de dados do ANSYS@ FluentTM. O coeficiente de difusão mássica da mistura foi calculado com base nos coeficientes das espécies utilizando a teoria cinética dos gases [58].

Referente às propriedades relacionadas à radiação adotou-se o coeficiente de absorção como função da composição da mistura através do recurso WSGGM (*Weighted Sum of Gray Gases Model*) com os dados propostos por [59]. Para o coeficiente de dispersão, o valor considerado foi $10^{-9}m^{-1}$, por se tratar de um meio transparente [21].

3.5. Estudo de Independência de Malha

A malha de volumes finitos deve ser suficientemente refinada para identificar as características importantes do escoamento. Malhas bem refinadas levam à erros numéricos de discretização menores. É de capital importância calcular com precisão os gradientes das variáveis, pois eles permitem o cálculo dos fluxos que interessam ao problema. Logo, o refino da malha foi feito nas regiões de altos gradientes, normalmente perto das entradas e das paredes. Para garantir que a malha seja a mais adequada possível, a um baixo custo computacional, um estudo de independência de malha foi realizado.

No presente trabalho, o estudo de independência de malha foi executado utilizando o método proposto pela ASME (*The American Society of Mechanical Engineers*) em 2008 [60]. O método utiliza o índice de convergência da malha (GCI, do inglês *Grid Convergence Index*). Esta técnica quantifica o erro numérico associado aos intervalos de discretização das equações diferenciais, ou seja, o erro associado ao refinamento da malha. O método consiste na utilização da extrapolação de Richardson [61] para estimar a ordem de incerteza numérica baseado nos resultados de, pelo menos, três malhas de diferentes graus de refinamento.

O primeiro passo do método é definir o tamanho representativo das malhas, uma vez que cada malha terá elementos e volumes de controle de tamanhos diferentes. Para as malhas desenvolvidas no presente trabalho, todas tridimensionais, o tamanho representativo das malhas é calculado da seguinte forma:

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (3.66)$$

onde N é o número de volumes de cada malha e ΔV_i é o valor do volume de cada célula das malhas. Em seguida, são gerados os resultados das simulações de, pelo menos, três malhas diferentes (aqui mencionadas como malhas M1, M2 e M3). O método recomenda que a razão entre as dimensões representativas de malhas subsequentes seja próxima do valor de 1,3. Ou seja, considerando três malhas com dimensões representativas h_1, h_2 e h_3 , calculadas pela Equação (3.66), as razões $r_{21} = \frac{h_2}{h_1}$ e $r_{32} = \frac{h_3}{h_2}$ devem se aproximar de 1,3.

O segundo passo é selecionar uma variável ϕ de interesse, que seja fisicamente significativa para o estudo, e calcular a “ordem aparente” p do método através da equação:

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + q(p) \right| \quad (3.67)$$

onde:

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \quad (3.68)$$

$$s = 1 \cdot \text{sen} \left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right) \quad (3.69)$$

$$\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1 \quad (3.70)$$

$$\varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2 \quad (3.71)$$

O terceiro passo é calcular o valor extrapolado da variável de interesse, bem como o erro relativo aproximado e extrapolado:

$$\phi_{ext}^{21} = (r_{21}^p \phi_1 - \phi_2) / (r_{21}^p - 1) \quad (3.72)$$

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \quad (3.73)$$

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{\phi_{ext}^{12} - \phi_1}{\phi_{ext}^{12}} \right| \quad (3.74)$$

Por fim, no quarto passo é calculado o índice de convergência da malha M2 em relação à malha M1:

$$GCI^{21} = \frac{1,25e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} \quad (3.75)$$

A Equação (3.75) calcula o *GCI* da malha M2 em relação à malha M1. Os passos 3 e 4 devem ser repetidos para o cálculo do *GCI* da malha M3 em relação à M2.

4. Resultados

4.1. Validação dos Modelos de Combustão Reduzidos

4.1.1. Modelo Reduzido de Combustão do Metano

Para validar os resultados obtidos com a utilização do mecanismo de cinética reduzido do metano, foram realizadas simulações do escoamento reativo no interior do combustor BERL, composto por um queimador de vórtice estabilizado (*swirl stabilized burner*) de 300 KW e uma fornalha vertical de seção ortogonal com duto de saída cilíndrico (Figura 4.1). Este equipamento foi desenvolvido pelo *Burner Engineering Research Laboratory* para a execução de experimentos relacionados à queima do gás natural e, por isto, é utilizado por pesquisadores para validar mecanismos, principalmente, de combustão e radiação [55] para o metano.

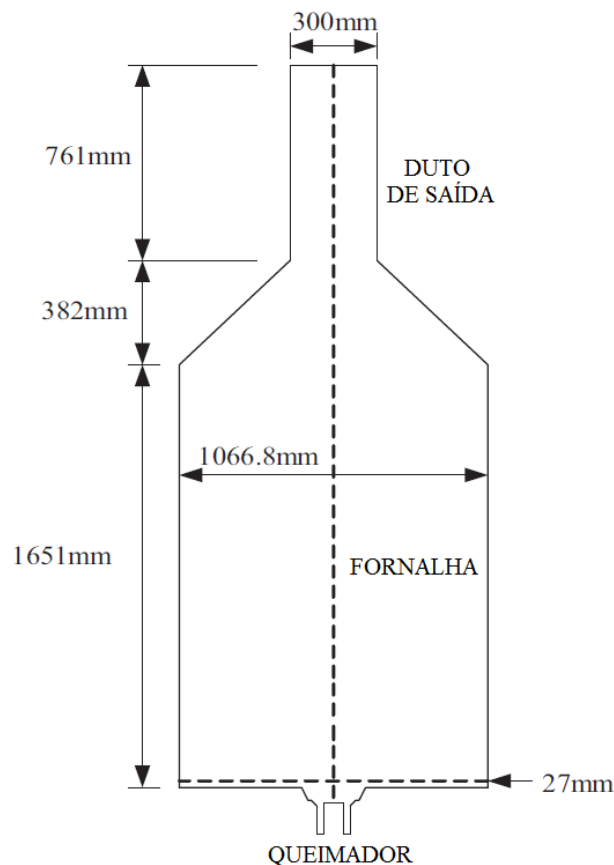


Figura 4. 1 – Esquema do combustor BERL de 300 KW com suas dimensões e com a localização da linha utilizada para coletar os dados para a validação. Fonte: adaptado de YAN [55].

Os resultados das simulações no combustor BERL utilizando o mecanismo de combustão reduzido foram comparados aos resultados das mesmas simulações utilizando o GRI-Mech 3.0 e aos dados experimentais. Em função da simetria axial do combustor, somente metade dele foi simulado. Para validar o modelo, três variáveis importantes foram escolhidas: velocidade axial, temperatura dos gases e concentração de O_2 .

Os perfis de velocidade axial, de temperatura e de concentração de O_2 ao longo de uma linha radial localizada a 27mm da saída do queimador (Figura 4. 2) são apresentados nas Figuras 4.2, 4.3 e 4.4.

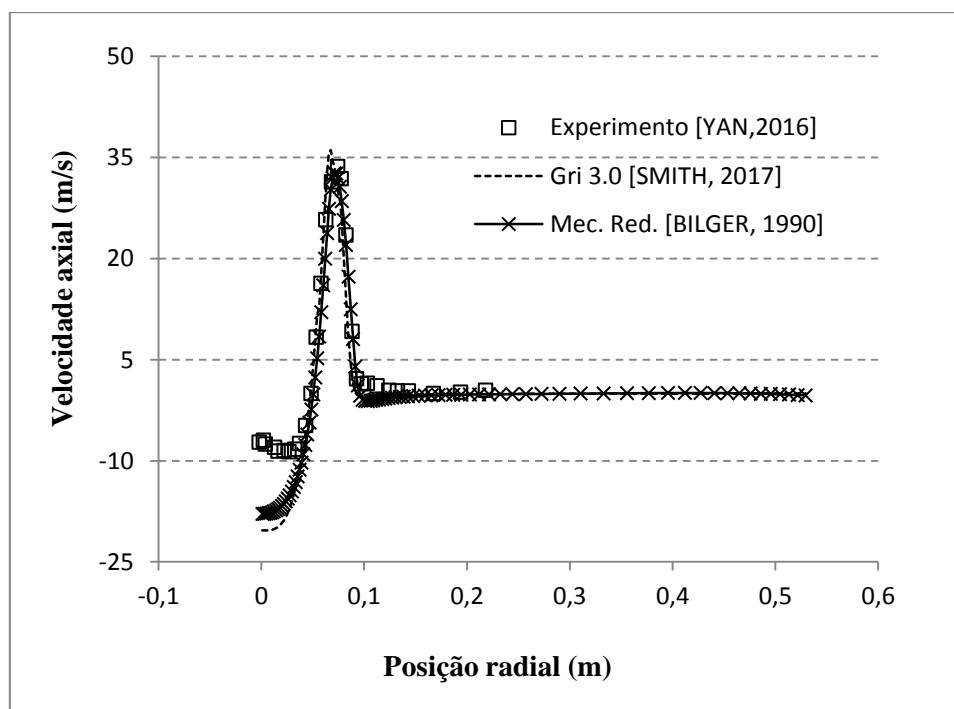


Figura 4. 2 – Perfis de velocidade radial ao longo da posição radial r para a combustão do metano.

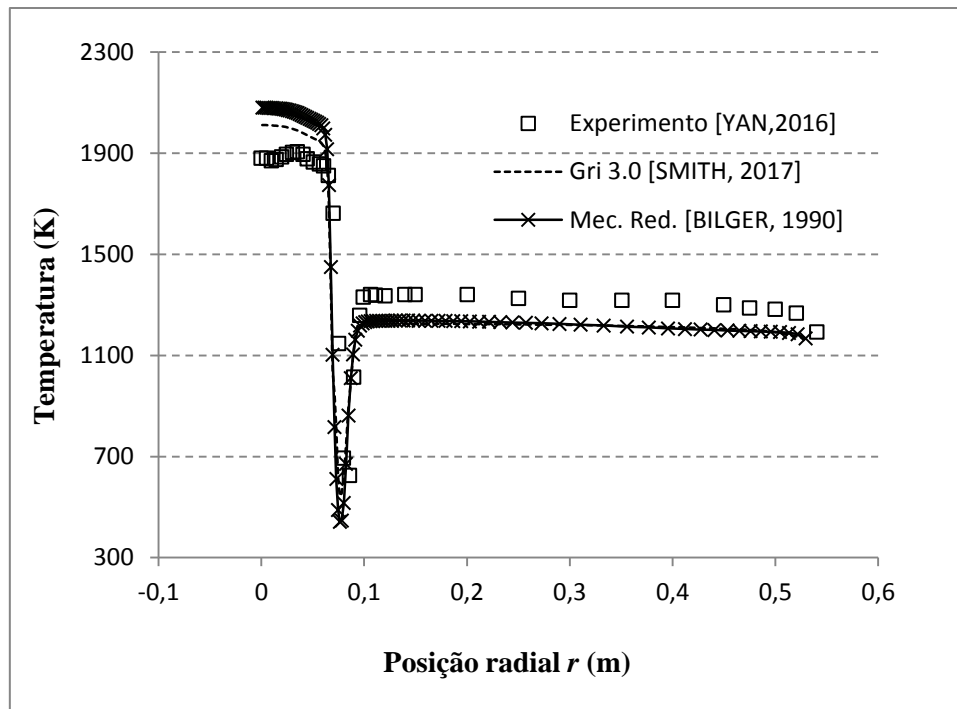


Figura 4. 3 – Perfis de temperatura ao longo da posição radial r para a combustão do metano.

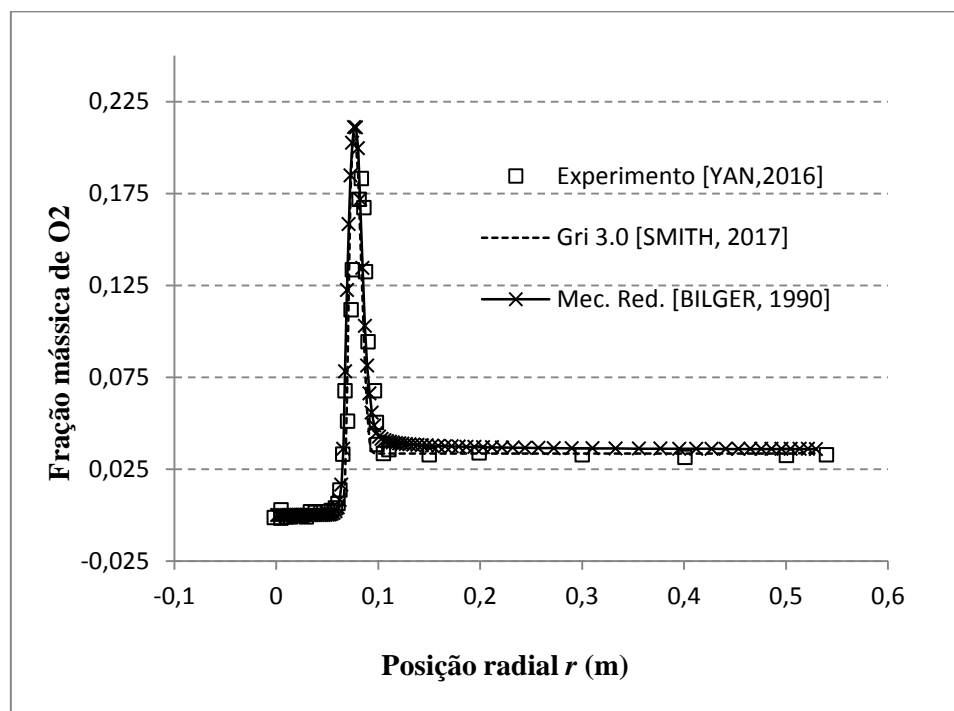


Figura 4. 4 – Perfis de concentração de O_2 ao longo da posição radial r para a combustão do metano

Da Figura 4. 2, nota-se que a velocidades axiais calculadas utilizando o modelo de combustão reduzido e completo são bem próximas dos dados experimentais para quase toda extensão da linha radial. Em função da alta velocidade de giro (*swirl velocity*) na entrada de ar do queimador, para posições radiais abaixo de 0,04 m as velocidades axiais preditas por ambos os modelos se distanciam cerca de 60% dos dados experimentais. Para o caso do presente trabalho isso não representa um problema pelo fato do escoamento próximo à saída dos queimadores não ser o objeto de estudo. Para regiões mais distantes do queimador ambos os modelos apresentam resultados aderentes aos dados reais.

Na Figura 4. 3, percebe-se que as temperaturas previstas por ambos os mecanismo são praticamente as mesmas, com exceção da região mais próxima da saída do queimador. Como mencionado anteriormente, a essa região não é objeto de estudo deste trabalho, não havendo desvios nos resultados devido ao uso do mecanismo reduzido.

Analizando a Figura 4. 4, pode ser visto que as simulações utilizando tanto o mecanismo reduzido como o completo apresentaram resultados aderentes aos dados experimentais ao longo de toda a linha radial do combustor.

Com os dados apresentados acima, o uso do mecanismo reduzido desenvolvido por BILGER [56] no lugar do mecanismo completo GRI-Mech 3.0 foi validado para ser utilizado nas simulações da combustão do metano interior da caldeira tangencial sem prejuízo para os resultados.

4.1.2. Modelo Reduzido de Combustão do Metanol

Com o intuito de validar os resultados obtidos com a utilização do mecanismo de cinética reduzido do metanol, foram realizadas simulações do escoamento reativo no interior do mesmo combustor BERL utilizado para validar o mecanismo reduzido do metano. Neste caso, o combustível foi trocado de metano para metanol.

Os resultados das simulações no combustor BERL utilizando o mecanismo de combustão reduzido do metanol foram comparados aos resultados das mesmas simulações utilizando o mecanismo completo desenvolvido e validado por HELD [54] Da mesma forma que para o metano, três variáveis importantes foram escolhidas para a validação: velocidade axial, temperatura dos gases e concentração de O_2 .

Os perfis de velocidade axial, de temperatura e de concentração de O_2 ao longo de uma linha radial localizada a 27mm da saída do queimador (Figura 4. 1) são apresentados nas Figuras 4.5, 4.6 e 4.7.

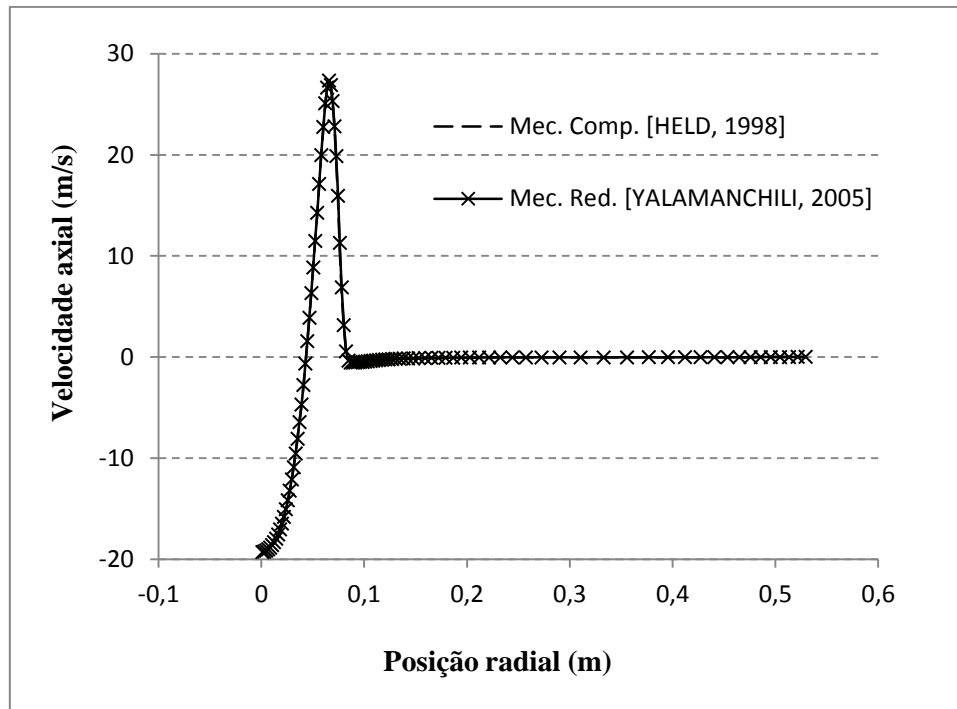


Figura 4. 5 – Perfis de velocidade radial ao longo da posição radial r para a combustão do metanol.

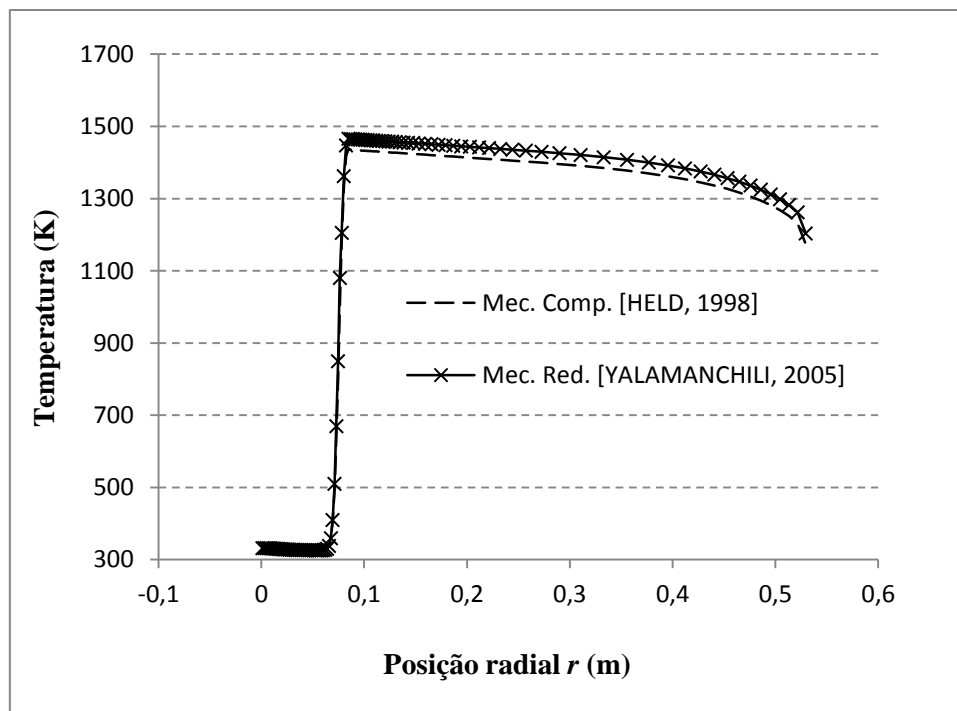


Figura 4. 6 – Perfis de temperatura ao longo da posição radial r para a combustão do metanol

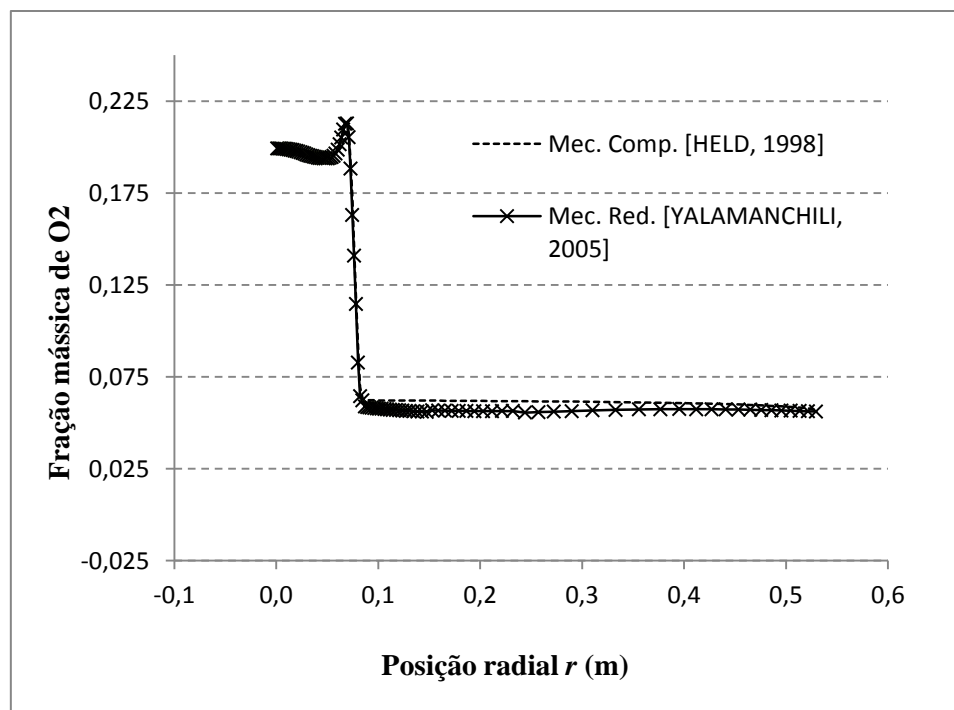


Figura 4. 7 – Perfis de concentração de O_2 ao longo da posição radial r para a combustão do metanol

Da Figura 4. 5, nota-se que as velocidades axiais calculadas são quase iguais em ambas as simulações utilizando o mecanismo reduzido e o mecanismo completo para todo o comprimento da linha radial r .

Na Figura 4. 6, percebe-se que as temperaturas previstas pelos mecanismos são praticamente as mesmas até cerca de 0,07m de distância da saída do queimador, a partir de onde a temperatura calculada pelo mecanismo reduzido é ligeiramente maior que a temperatura calculada pelo mecanismo completo. A máxima diferença de temperatura entre os modelos é de 8,46%.

A Figura 4. 7 mostra que a fração mássica de O_2 para os dois mecanismos se comporta de maneira semelhante à temperatura: valores quase idênticos de 0 a 0,07m da saída do queimador. A partir desse ponto a fração mássica de O_2 prevista pelo mecanismo reduzido é ligeiramente menor que a calculada pelo mecanismo completo. A máxima diferença é de 9,94%.

Com os dados apresentados acima, o uso do mecanismo reduzido desenvolvido por YALAMANCHILI [57] para o metanol, no lugar do mecanismo completo desenvolvido HELD [54], foi validado para ser utilizado nas simulações da combustão do metanol no interior da caldeira tangencial sem prejuízo para os resultados.

4.2. Estudo de Independência de malha

Como dito anteriormente, as malhas utilizadas nas simulações devem ser suficientemente refinadas para capturar as características importantes do escoamento e minimizar os erros de discretização ao menor custo computacional possível. Para se identificar a melhor malha foi realizado um estudo de independência de malha para os queimadores e para a fornalha.

Para a realização da análise utilizou-se somente a condição de operação de referência, também usada para comparação com os resultados apresentada no item 4.4. Conforme a metodologia apresentada, o índice de convergência da malha (GCI), criado no método proposto pela ASME em 2008 [60], foi calculado para três malhas de refinamentos diferentes nos queimadores de metano, metanol e na fornalha e, a partir dele, a melhor malha foi selecionada para cada componente da simulação.

4.2.1. Queimador de Metano

As regiões de saída dos queimadores de metano são as mais importantes, pois os perfis de velocidade e de temperatura na saída foram importados como condições de contorno de entrada na simulação da fornalha. Por isso, no estudo de convergência de malha do queimador de metano, o GCI foi avaliado para três malhas diferentes ao longo de uma linha radial na saída de um dos bicos do queimador, conforme ilustra a Figura 4. 8. As Tabelas 4.1 e 4.2 apresentam as características das três malhas desenvolvidas para este queimador.

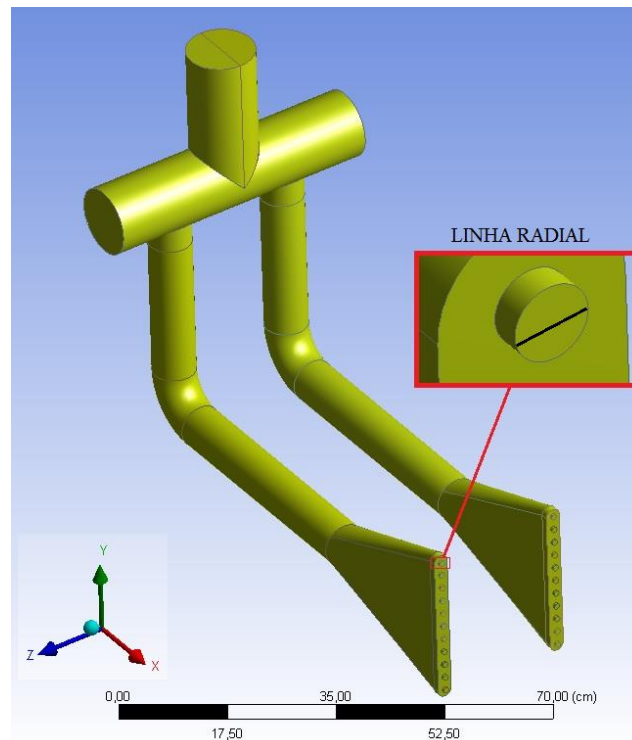


Figura 4. 8 – Detalhe da linha radial na saída do queimador de metano.

Tabela 4. 1 – Número de elementos das malhas testadas pra o queimador de metano.

Malha	M1	M2	M3
Nº de elementos	1.101.805	2.579.842	5.691.536

Tabela 4. 2 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para o queimador de metano.

Razão	Valor
r_{21}	1,33
r_{32}	1,30

O índice de convergência de malha (GCI) foi calculado através da Equação (3.75) e é apresentado para a malha M2 em relação à M1 e para a malha M3 em relação à M2 nas Figuras 4.9 e 4.10, respectivamente.

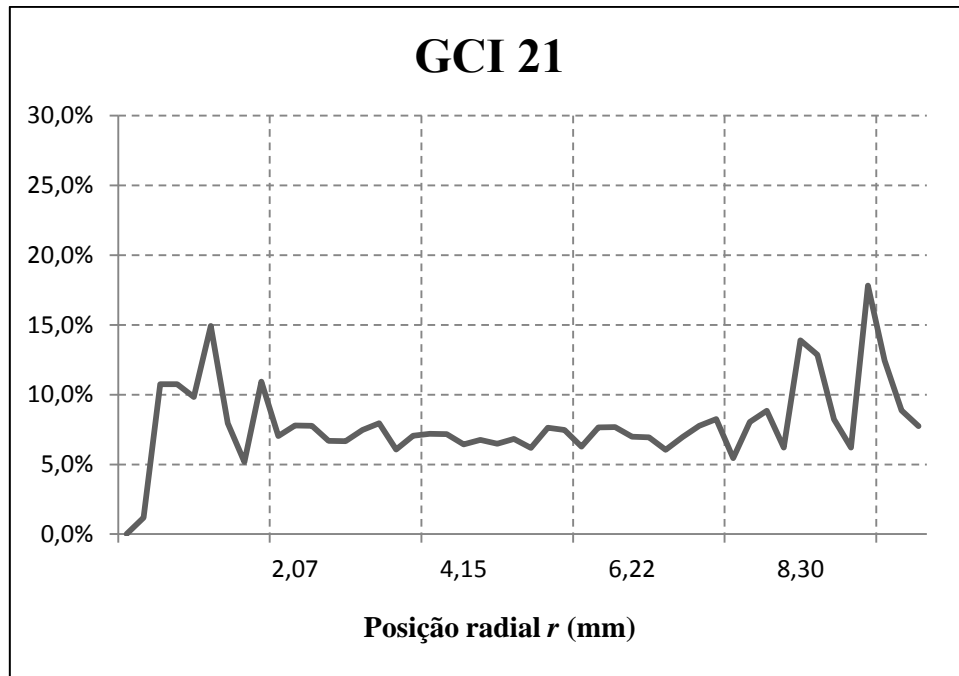


Figura 4. 9 – GCI da malha M2 em relação à malha M1 para o queimador de gás natural.

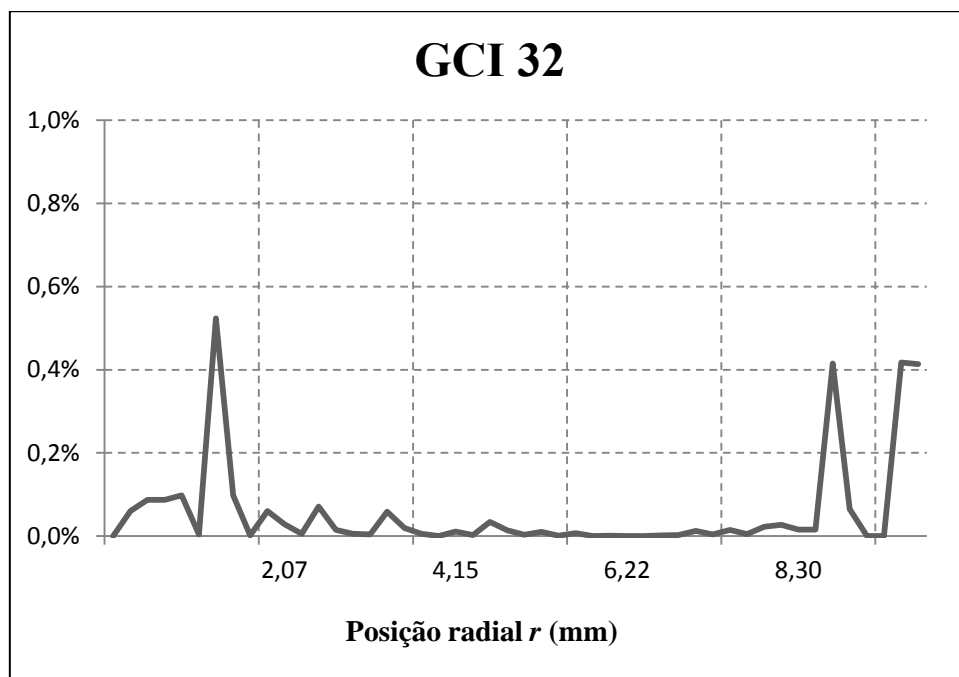


Figura 4. 10 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para o queimador de gás natural.

O valor do GCI máximo da malha M2 em relação à M1 ultrapassa os 15%, indicando que a malha M1 necessita de refinamento. Já o GCI da malha M3 em relação à M2 apresenta valor máximo em torno de 0,5%. Portanto, a malha M2 pode ser utilizada sem prejuízo para os resultados, pois é suficientemente refinada.

4.2.2. Queimador de Metanol

Assim como para os queimadores de metano, as regiões de saída dos queimadores de metanol são as mais importantes, pois os perfis de velocidade e de temperatura na saída foram importados como condições de contorno de entrada na simulação da fornalha. Por isso, no estudo de convergência de malha do queimador de metanol, o GCI também foi avaliado para três malhas diferentes ao longo de uma linha radial na saída de um dos bicos do queimador, conforme ilustra a Figura 4. 11. As Tabelas 4.3 e 4.4 apresentam as características das três malhas desenvolvidas para este queimador.

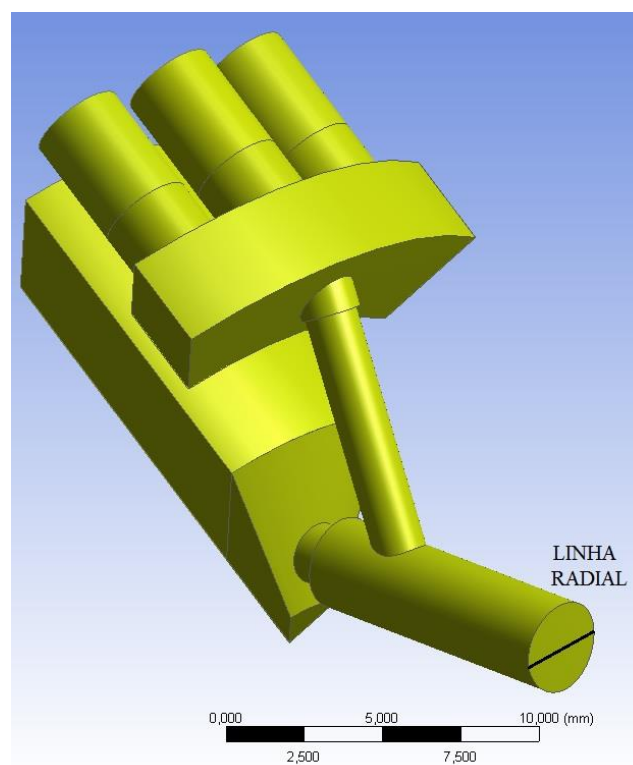


Figura 4. 11 – Detalhe da linha radial na saída do queimador de metanol.

Tabela 4. 3 – Número de elementos das malhas testadas pra o queimador de metanol.

Malha	M1	M2	M3
Nº de elementos	117.398	267.632	619.840

Tabela 4. 4 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para o queimador de metanol.

Razão	Valor
r_{21}	1,32
r_{32}	1,30

O índice de convergência de malha (GCI) foi calculado através da Equação (3.75) e é apresentado para a malha M2 em relação à M1 e para a malha M3 em relação à M2 nas figuras 4.12 e 4.13, respectivamente.

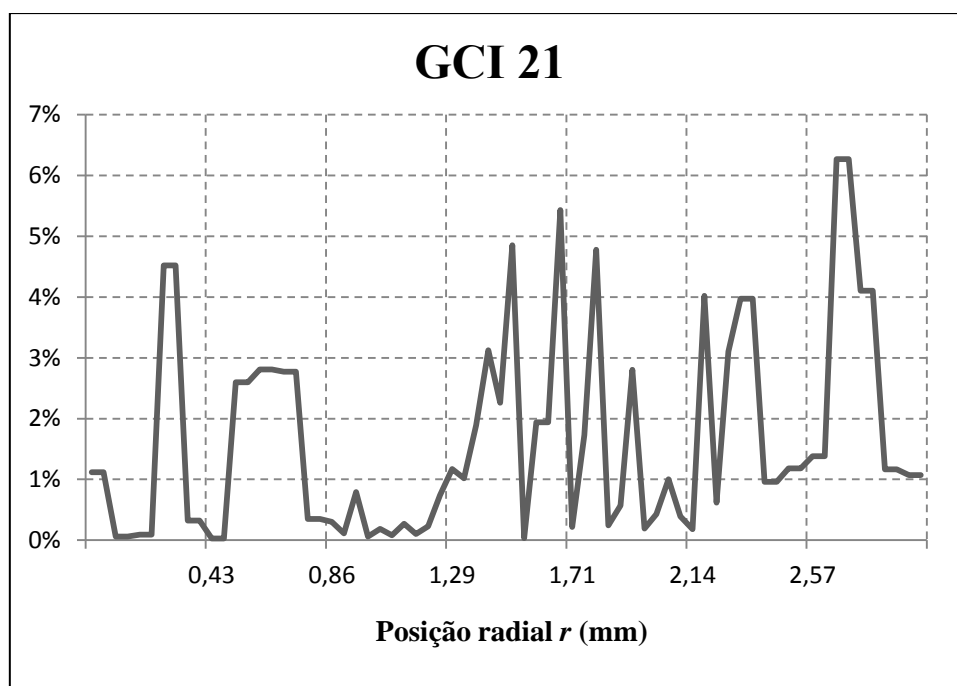


Figura 4. 12 – GCI da malha M2 em relação à malha M1 para o queimador de metanol.

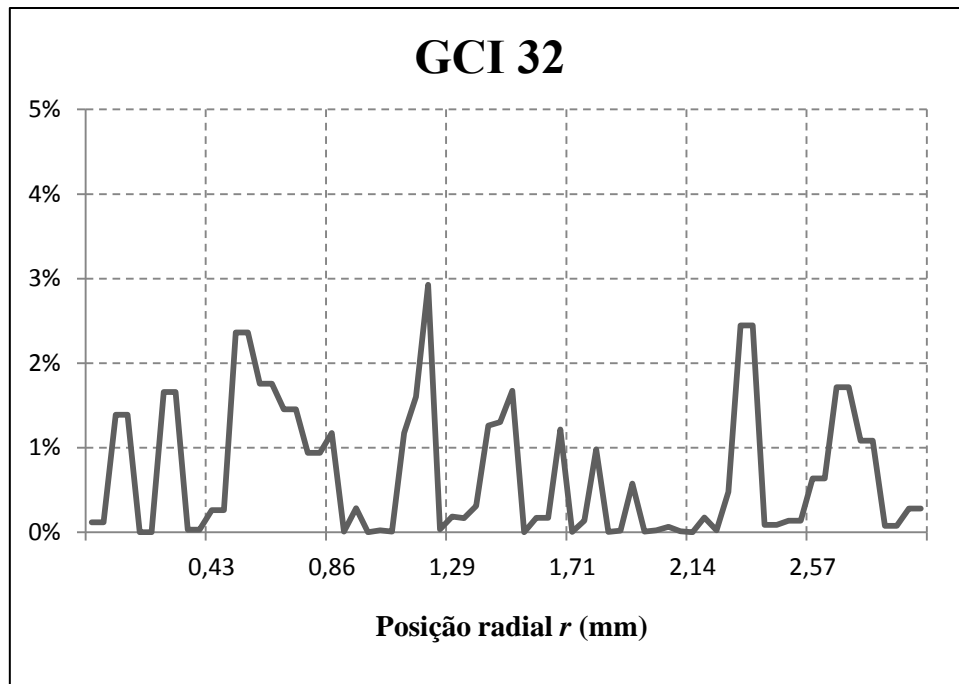


Figura 4. 13 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para o queimador de metanol..

O valor do GCI máximo da malha M2 em relação à M1 é cerca de 6%, indicando que a malha M1 já possui um refinamento adequado, mas que pode ser melhorado. Já o GCI da malha M3 em relação à M2 apresenta valor máximo em torno de 3%, garantindo que a malha M2 pode ser escolhida. A malha M1 poderia ser utilizada, mas como todas as malhas possuem um número de elementos baixo para os recursos computacionais disponíveis, a malha M2 foi escolhida.

4.2.3. Difusor de Ar Primário

No caso do difusor de ar primário as áreas de saída também são as mais importantes, pelo mesmo motivo dos queimadores: os perfis de velocidade e de temperatura na saída foram importados como condições de contorno de entrada na simulação da fornalha. No estudo de convergência de malha do difusor, o GCI foi avaliado para três malhas diferentes ao longo de uma linha que cruza uma das áreas de saída, conforme ilustra a Figura 4. 14. As Tabelas 4.5 e 4.6 apresentam as características das três malhas desenvolvidas.

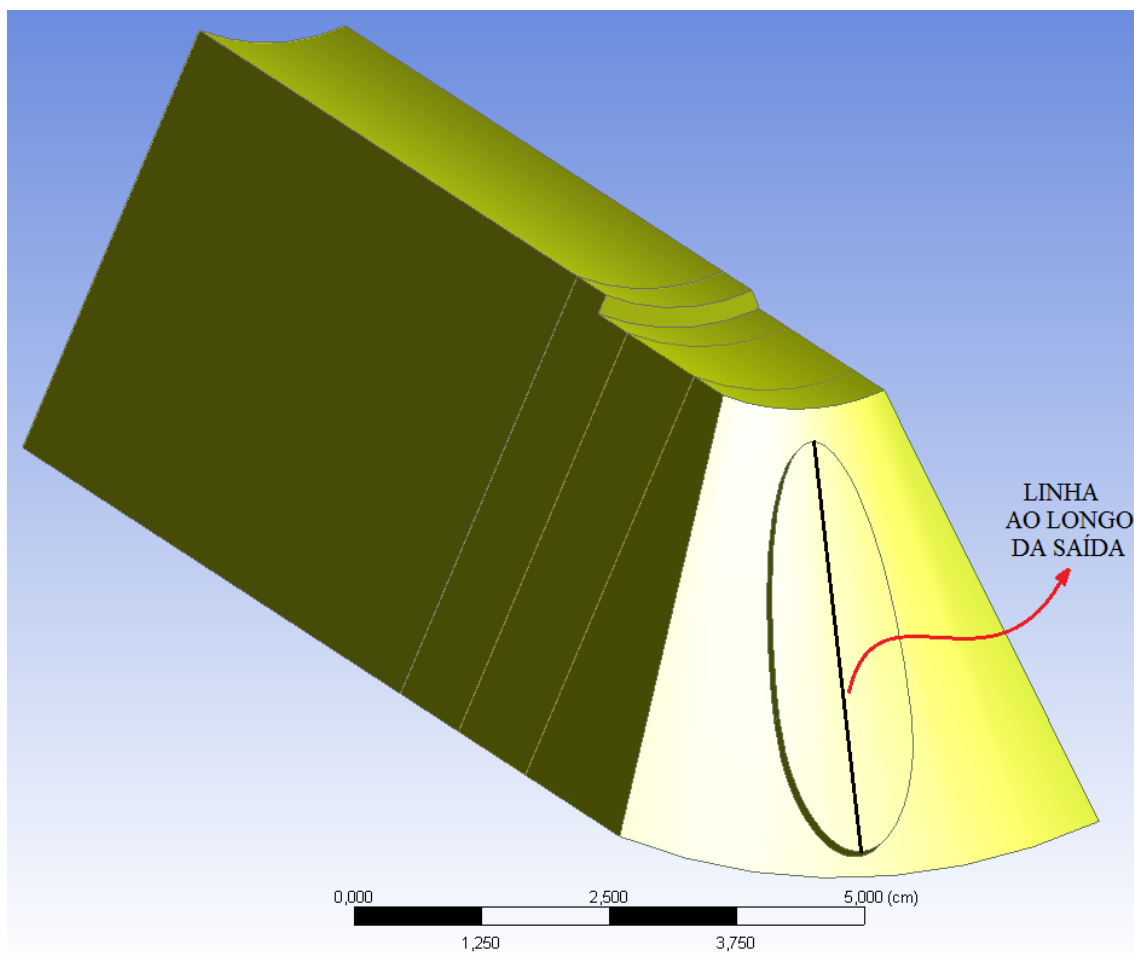


Figura 4. 14 – Detalhe da linha na saída do difusor de ar primário.

Tabela 4. 5 – Número de elementos das malhas testadas pra o difusor de ar primário.

Malha	M1	M2	M3
Nº de elementos	317.793	762.501	1.678.651

Tabela 4. 6 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para o difusor de ar primário.

Razão	Valor
r_{21}	1,34
r_{32}	1,31

O índice de convergência de malha (GCI) foi calculado através da Equação (3.75) e é apresentado para a malha M2 em relação à M1 e para a malha M3 em relação à M2 nas Figuras 4.15 e 4.16, respectivamente.

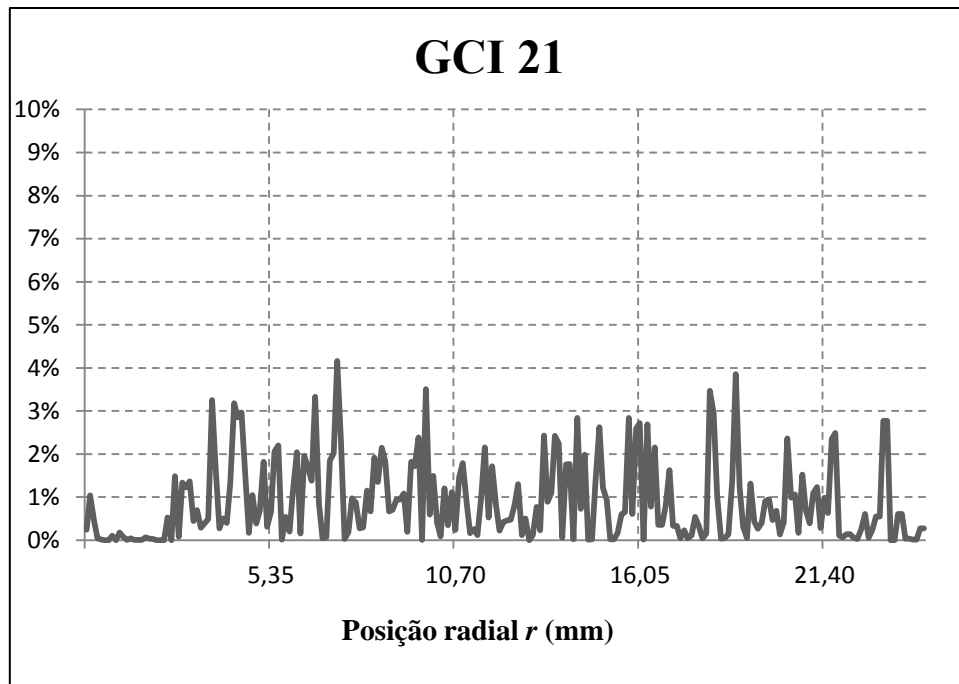


Figura 4. 15 – GCI da malha M2 em relação à malha M1 para o difusor de ar primário.

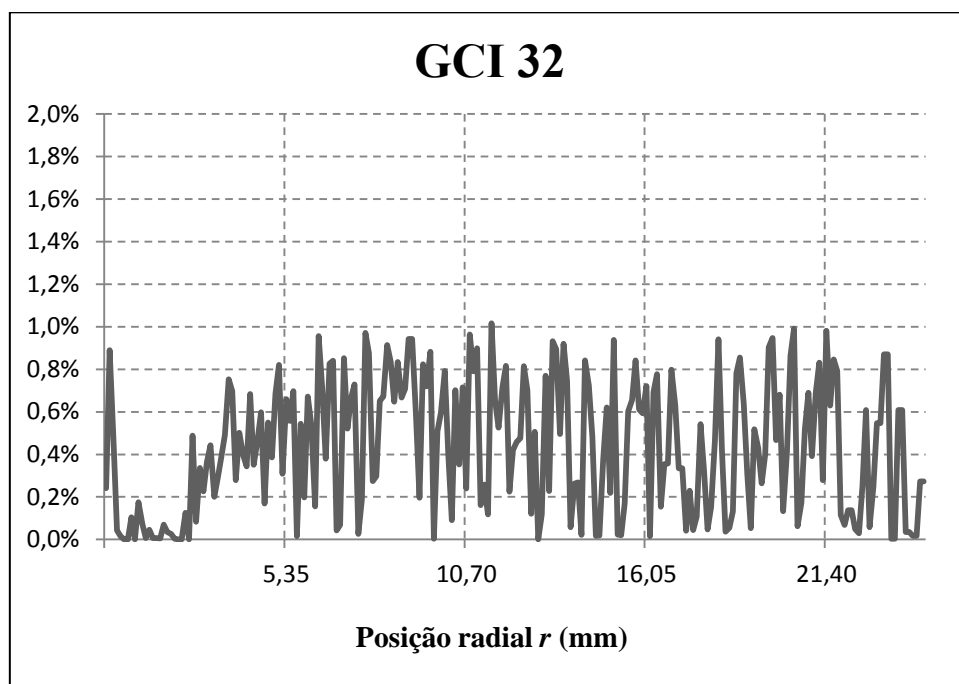


Figura 4. 16 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para o difusor de ar primário.

O valor do GCI máximo da malha M2 em relação à M1 gira em torno de 4%, indicando que a malha M1 já possui um refinamento adequado, mas que pode ser melhorado. Já o GCI da malha M3 em relação à M2 apresenta valor máximo em torno

de 1%, garantindo que a malha M2 pode ser escolhida. A malha M1 poderia ser utilizada, mas como todas as malhas possuem um número de elementos baixo para os recursos computacionais disponíveis, a malha M2 foi escolhida.

4.2.4. Fornalha

Na fornalha, a região próxima aos queimadores, onde se inicia a combustão é a mais sensível ao refinamento de malha, onde os gradientes são maiores e a discretização espacial desempenha papel mais importante. Para avaliar a convergência de malha da fornalha, o GCI foi avaliado para três malhas diferentes ao longo de uma linha reta traçada em um plano que corta a fornalha transversalmente na altura dos queimadores de gás natural do primeiro patamar, conforme ilustra a Figura 4. 17. As Tabelas 4.7 e 4.8 apresentam as características das três malhas desenvolvidas para a fornalha.

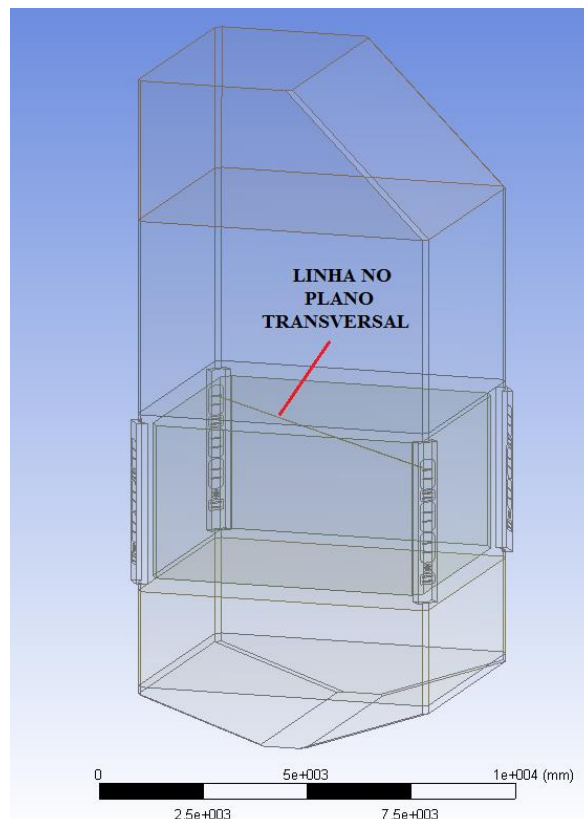


Figura 4. 17– Detalhe da linha no plano transversal na altura dos queimadores.

Tabela 4. 7– Número de elementos das malhas testadas pra a fornalha.

Malha	M1	M2	M3
Nº de elementos	1.922.839	4.321.606	9.493.380

Tabela 4. 8 – Razões entre as dimensões das malhas testadas para a fornalha.

Razão	Valor
r_{21}	1,31
r_{32}	1,30

O índice de convergência de malha (GCI) foi calculado através da Equação (3.75) e é apresentado para a malha M2 em relação à M1 e para a malha M3 em relação à M2 nas Figuras 4.18 e 4.19, respectivamente.

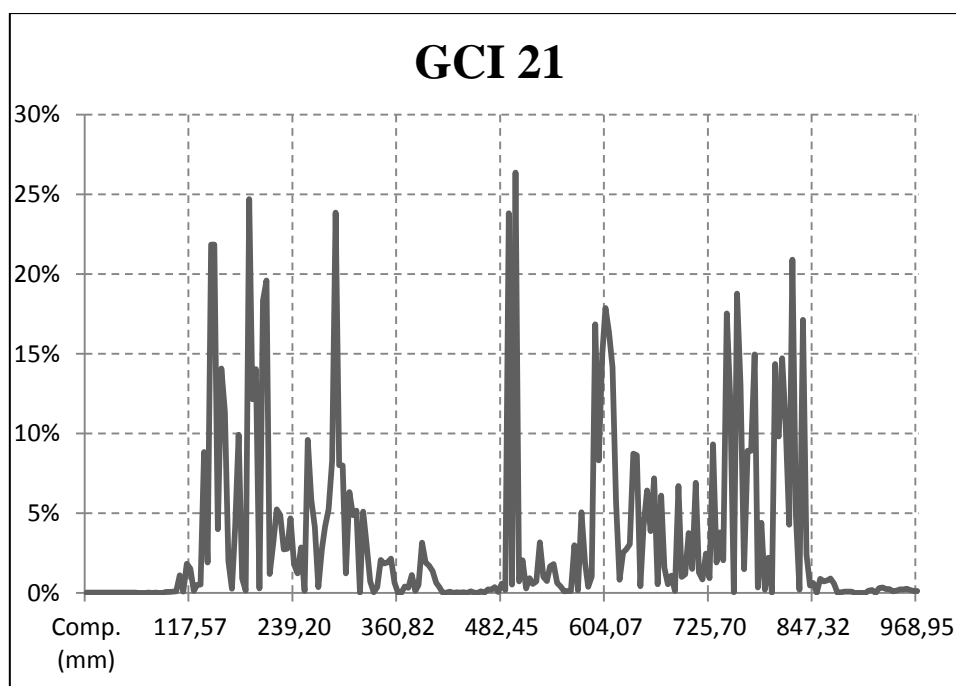


Figura 4. 18– GCI da malha M2 em relação à malha M1 para a fornalha.

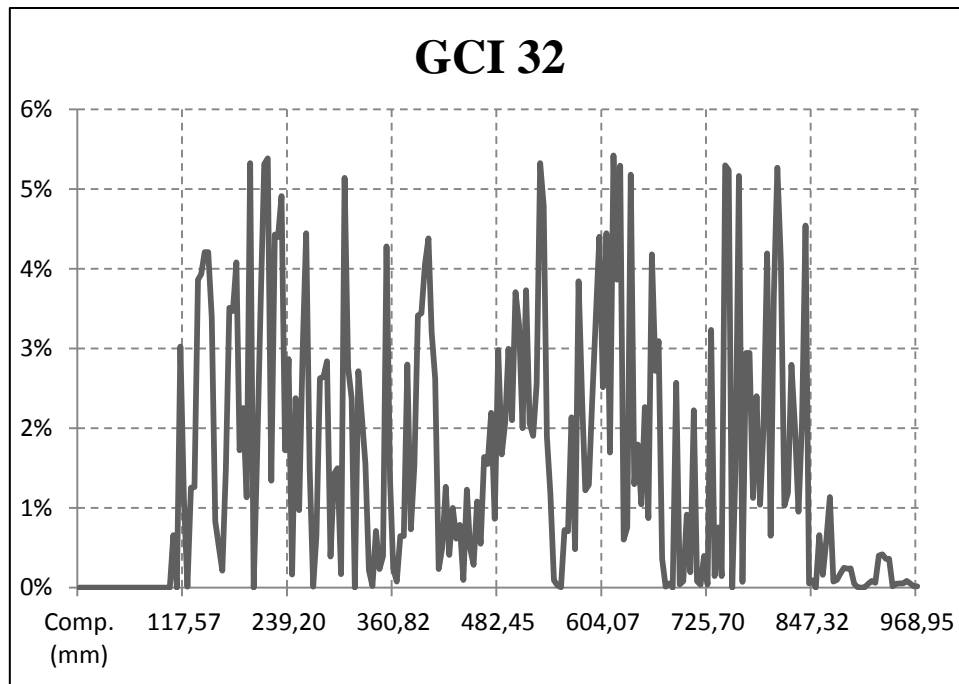


Figura 4. 19 – GCI da malha M3 em relação à malha M2 para a fornalha.

O valor do GCI máximo da malha M2 em relação à M1 ultrapassa os 25%, indicando que a malha M1 necessita de refinamento. Já o GCI da malha M3 em relação à M2 apresenta valor máximo pouco acima dos 5%. Portanto, a malha M2 pode ser utilizada sem prejuízo para os resultados, pois é suficientemente refinada.

4.3. Verificação dos perfis de saída dos queimadores

Como mencionado na metodologia, apenas um queimador de gás natural e um queimador de metanol foram simulados e os perfis de velocidade, pressão e temperatura nas suas saídas foram importados como condições de contorno de entrada na fornalha. O ANSYS@ FluentTM realiza uma interpolação dos resultados quando os perfis são importados utilizando três métodos possíveis: Interpolação de Ordem Zero, no qual o valor da variável de um elemento é assumido como o valor do elemento mais próximo no perfil, Distância Inversa, que contabiliza a contribuição dos elementos mais próximos ponderando pelo inverso da distância e Menores Quadrados, que realiza uma interpolação de primeira ordem minimizando a soma dos quadrados dos resíduos.

Os três métodos foram testados e o que apresentou o melhor resultado foi o Distância Inversa. O perfil de velocidade na saída do queimador de metano e o resultado

interpolado na entrada da fornalha são apresentados na Figura 4. 20. A Figura 4. 21 mostra o erro relativo entre os dois perfis para uma linha radial na saída do queimador e na entrada da fornalha. Como pode ser observado o erro relativo máximo não ultrapassa os 6%, considerado aceitável para o estudo.

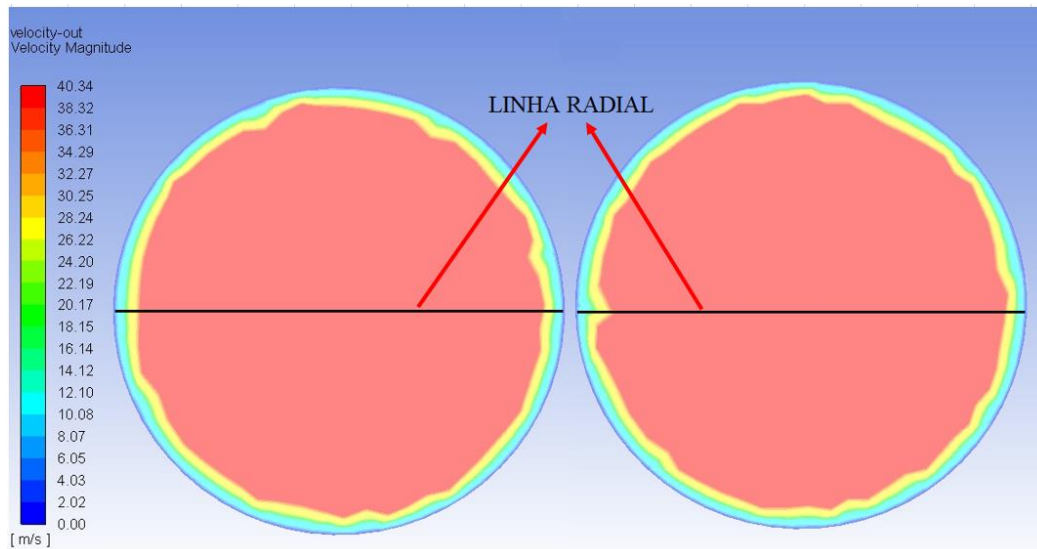


Figura 4. 20 – Perfis de velocidade na saída do queimador de metanol (esquerda) e interpolado na entrada da fornalha (direita).

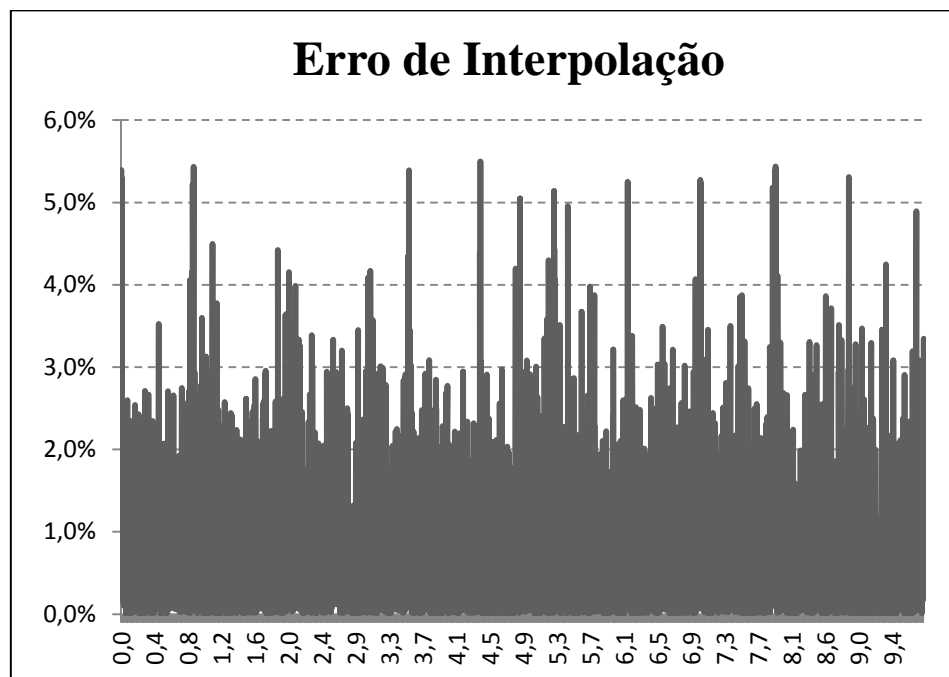


Figura 4. 21 – Erro relativo entre o perfil de velocidade na saída do queimador de metanol e o interpolado na entrada da fornalha ao longo da linha radial da Figura 4.17.

4.4. Verificação da solução com dados experimentais

As informações disponíveis acerca da combustão no interior da fornalha se resumem às imagens de vídeo gravadas por uma câmera com medição de temperatura por pirômetro. Em função da escassez de dados experimentais existentes, foi realizada uma verificação dos resultados numéricos, em detrimento de validação, com a finalidade de avaliar a consistência dos modelos adotados e a representatividade das simulações, conforme descrito por AIAA [63]. Para tal, durante a operação real da caldeira nas condições em que as simulações foram realizadas, o perfil da chama capturado pela câmera de vídeo foi comparado com os resultados calculados. As Figuras 4.22 e 4.23 mostram o plano de visão da câmera na fornalha e o plano equivalente no modelo tridimensional utilizado neste trabalho.

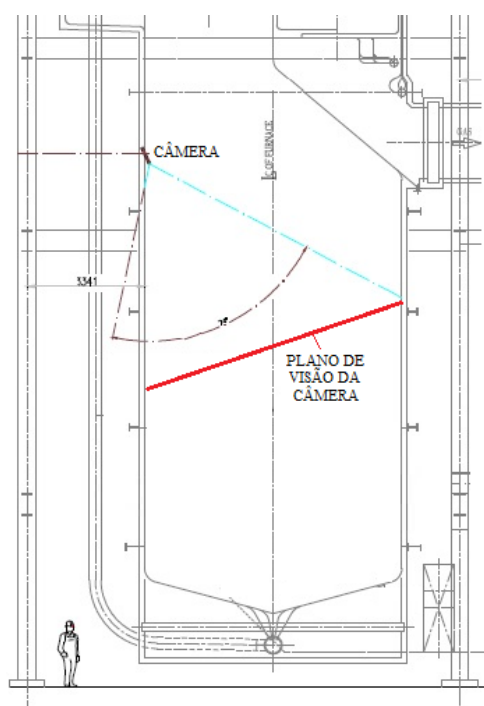
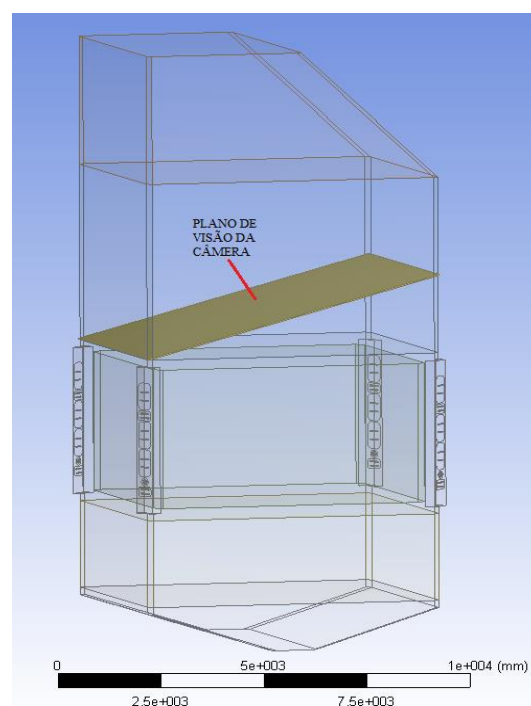


Figura 4. 22 – Plano de visão da câmera na fornalha.



23Figura 4. 23 – Plano de visão da câmera no modelo tridimensional.

A imagem da chama capturada pela câmera é apresentada na Figura 4.24, com medição da temperatura em cinco pontos diferentes. Os resultados para o perfil de temperatura calculado no plano equivalente ao de visão da câmera no modelo computacional foram pós processados e apresentados na Figura 4.25. Nos resultados

calculados, a temperatura para os mesmos pontos da Figura 4.24 foram estimados através das médias espaciais no interior das marcações feitas na Figura 4.25 (retângulos equivalentes aos da Figura 4.24). Na figura 4.26 é possível enxergar o formato da chama visível gerada nas simulações através da isosuperfície da fração mássica de CO igual a 0,01 [64].

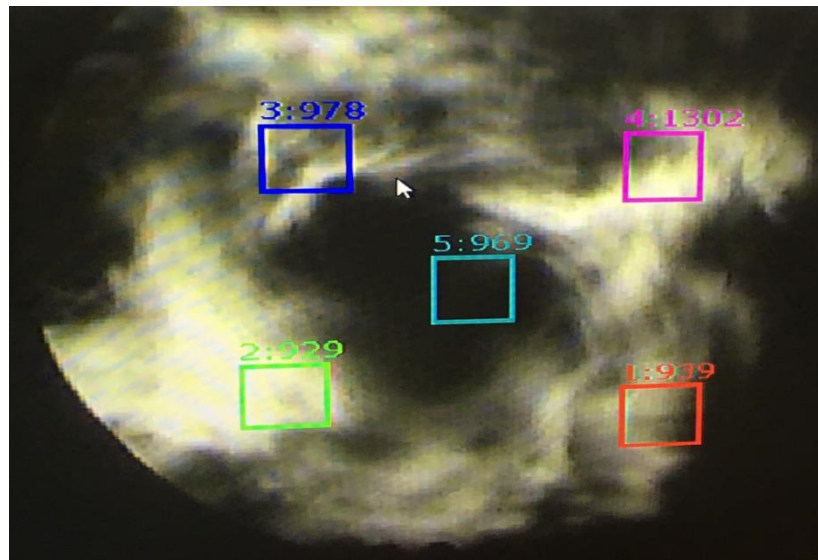


Figura 4.24 – Imagem com medição de temperatura capturada pela câmera de vídeo da fornalha.

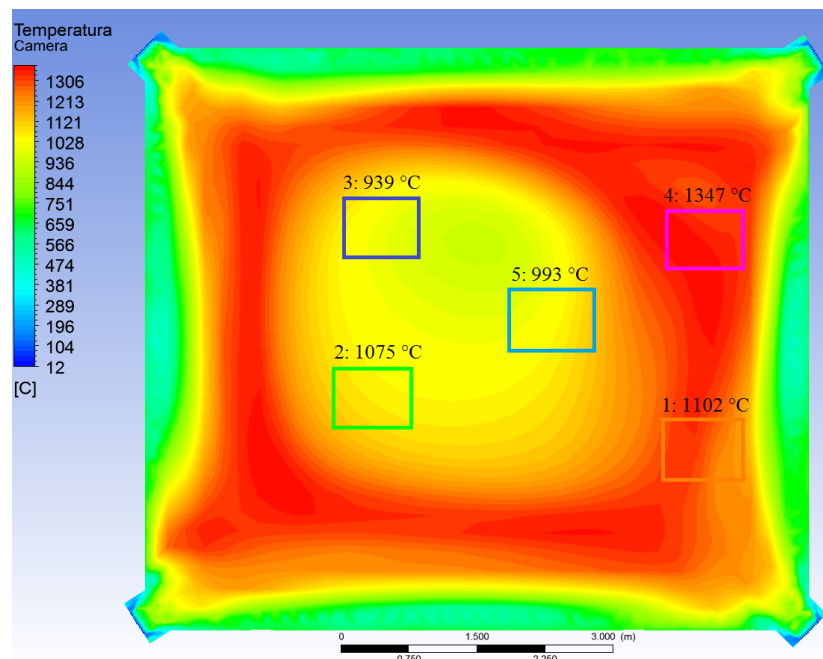


Figura 4.25 – Perfil de temperatura do plano equivalente ao da imagem capturada pela câmera.

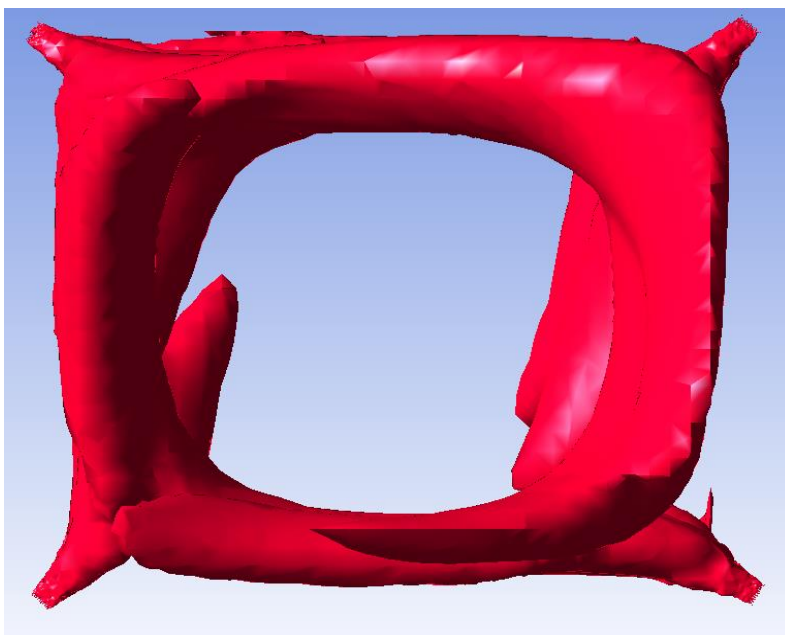


Figura 4.26 – Isosuperfície da fração mássica de CO igual a 0,01 gerada nas simulações.

Comparando os perfis de temperatura das Figuras 4.24 e 4.25 e o formato estimado da chama na Figura 4.26 com o real, percebe-se a aderência entre os resultados calculados e os experimentais capturados pela câmera. Desta forma, A solução obtida pelas simulações realizadas neste trabalho de acordo com a metodologia apresentada se mostra consistente (fornecendo os resultados esperados) e passível de validação no momento em que mais dados experimentais estiverem disponíveis.

4.5. Análise do superaquecimento

Utilizando o modelo cujos resultados foram verificados, o impacto das chamas na temperatura das paredes dos tubos foi investigado. Conforme descrito na metodologia, as paredes da fornalha foram modeladas como aço carbono com espessura de quatro milímetros com uma camada de magnetita de um milímetro no lado da água. O fluxo de calor foi modelado como convecção com água numa temperatura constante (saturação).

A Figura 4.27 apresenta os contornos de temperatura nas quatro paredes da fornalha (sul, oeste, norte e leste), indicando o fenômeno de superaquecimento na caldeira. Conforme reportado na revisão da literatura, para tubos de aço carbono com temperaturas de parede acima de $428\text{ }^{\circ}\text{C}$ há superaquecimento. Assim sendo, se

identifica o referido fenômeno em todas as paredes, na região do primeiro patamar de queimadores e na região acima, até a saída da fornalha, com picos de temperatura acima de 890°C nas paredes oeste e norte. As regiões apontadas estão de acordo com os resultados previstos na literatura para casos semelhantes [8].

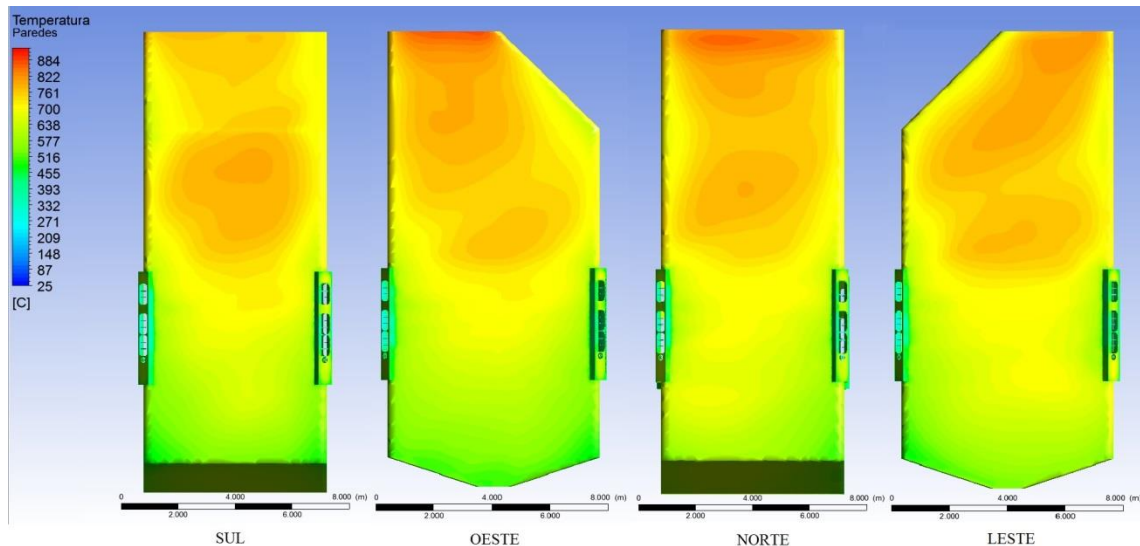


Figura 4.27 – Perfis de temperatura nas paredes da fornalha.

A seguir é apresentada, na Figura 4.28, os perfis de temperatura dos gases em dois planos verticais ortogonais. Avaliando esses perfis, percebe-se que, em função das altas velocidades nas saídas dos queimadores e ao processo de mistura antes da combustão, os gases quentes se aproximam das paredes em pontos mais acima na fornalha, o que explica o superaquecimento nessas áreas. A restrição da área de passagem na saída da caldeira também contribui para o aumento de fluxo de calor para as paredes e o consequente aumento de temperatura. As linhas de corrente coloridas pela temperatura (exibidas na Figura 4.29) evidenciam esse fenômeno.

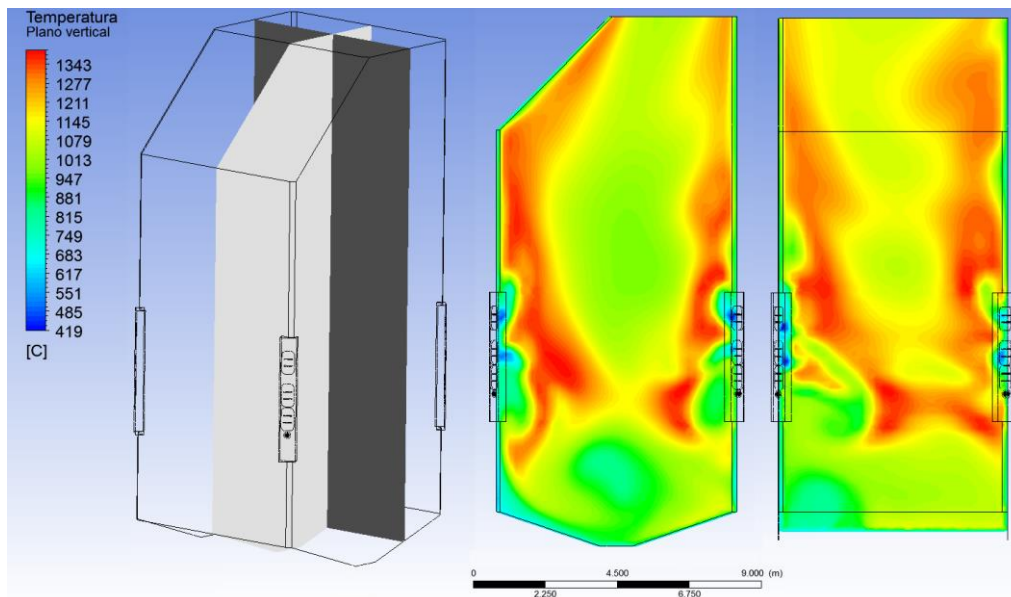


Figura 4.28 – Perfis de temperatura nos planos verticais.

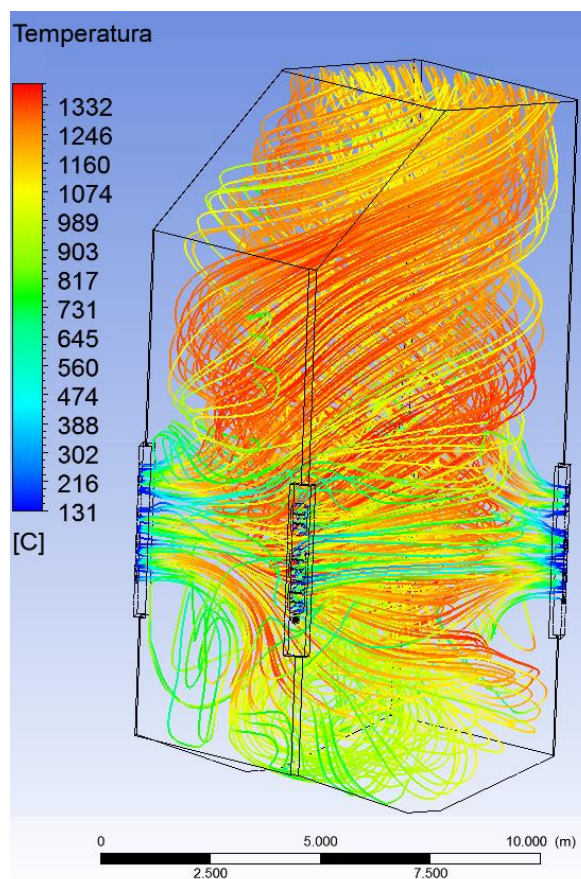


Figura 4.29 – Linhas de corrente coloridas pela temperatura.

5. Conclusões e Recomendações

Um problema comum durante a operação de caldeiras de queima tangencial é o superaquecimento dos tubos que formam as paredes da fornalha, o que pode levar à corrosão, ruptura e falha dos tubos; à parada da caldeira; e até mesmo à acidentes. No presente trabalho, o escoamento reativo resultado da combustão simultânea de dois combustíveis diferentes, gás natural e metanol, em uma caldeira de queima tangencial foi modelado através de técnicas numéricas de dinâmica dos fluidos computacional (CFD) com o intuito de investigar o superaquecimento nas paredes de tubos reportado pela operação do equipamento real. Além da fornalha, os queimadores de gás natural e de metanol, bem como o difusor de ar foram detalhadamente modelados para caracterizar de forma realista as condições de contorno na entrada da fornalha.

A solução numérica do escoamento foi desenvolvida utilizando o pacote comercial ANSYS@ FluentTM. Foram empregados os modelos SST $k - w$, *Eddy Dissipation Concept* e Ordenadas Discretas para descrever o escoamento reativo turbulento e a transferência de calor por radiação. O processo multifásico de atomização do metanol líquido com ar comprimido também foi tratado, lançando mão do Modelo de Mistura.

Depois de realizados estudos de convergência de malha e verificados os resultados através de dados coletados por câmera de vídeo com medição de temperatura no interior da fornalha, as regiões de superaquecimento foram identificadas. As principais conclusões obtidas com este estudo, bem como as recomendações para trabalhos futuros são detalhadas a seguir.

5.1. Conclusões

Os resultados obtidos no desenvolvimento deste trabalho permitiram confirmar a tendência de superaquecimento nas paredes da fornalha de uma caldeira de queima tangencial utilizando dois combustíveis diferentes. As condições de operação reais da caldeira foram introduzidas e o padrão de escoamento reproduzido conforme se esperava, de acordo com as informações reportadas pela literatura para este tipo de equipamento. A análise qualitativa do escoamento em conjunto com a verificação realizada através das imagens da câmera de vídeo levam à conclusão de que o modelo

desenvolvido poderá ser utilizado para prever o padrão de escoamento no interior da fornalha e determinar regiões propícias a sofrer superaquecimento. Depois de validado com mais dados experimentais, o modelo poderá ser utilizado para avaliar quantitativamente o escoamento, levantar diagnósticos precisos da operação e realizar estudos científicos detalhados dos fenômenos físicos.

As regiões de superaquecimento foram identificadas e os resultados apontam que uma grande região acima dos queimadores apresenta temperaturas elevadas, bem acima da temperatura inicial de superaquecimento referida na literatura, em todas as paredes. As temperaturas calculadas também estão de acordo com o reportado na literatura. Como as correntes de combustível e de ar foram distribuídas igualmente nos quatro cantos da fornalha e o ar secundário se introduziu ortogonalmente na caldeira (conforme condição operacional reproduzida na modelagem), o vórtice de chama criado é quase uniforme no plano transversal dos queimadores, conforme Figura 4.25. Uma pequena distorção é aplicada ao vórtice por influência dos ângulos dos queimadores (Figura 3.1) e da restrição da área de passagem na parte superior da fornalha. Porém, esta distorção não impede que as chamas se aproximem das todas as paredes, causando nas quatro, elevações nas temperaturas de intensidades semelhantes. Portanto, pode-se concluir que, para reduzir o superaquecimento, é necessário fazer uma avaliação da influência da vazão de combustíveis e consequente aporte e térmico e do excesso de ar na fornalha, como no trabalho de TANG [8].

Uma ampla revisão bibliográfica dos modelos de turbulência, combustão, radiação e de escoamentos multifásicos foi realizada e os modelos mais adequados foram selecionados para melhor caracterizar o escoamento. Como resultado, os campos de temperatura foram reproduzidos adequadamente, conforme a verificação apresentada, constatando que os modelos e as propriedades da mistura de gases foram devidamente configurados.

Também como conclusão deste trabalho, os modelos de cinética reduzida utilizados para o metano e metanol representam adequadamente a combustão destas correntes, conforme reportado nos resultados e podem ser empregados sem perda de acurácia em avaliações que não envolvem a previsão da geração de compostos intermediários ou de poluentes como NOx.

Como principal resultado deste trabalho, se construiu um modelo completo e detalhado capaz de reproduzir o complexo processo de combustão no interior da

fornalha de uma caldeira de queima tangencial real de grande capacidade, incluindo a modelagem detalhada dos queimadores. Com este modelo é possível simular quaisquer condições de operação do equipamento, prever e antecipar falhas e realizar estudos para melhorias de desempenho. Quaisquer simulações realizadas poderão dar suporte e confiabilidade às mudanças que venham a ser introduzidas no equipamento, reduzindo vigorosamente os custos das intervenções.

Para o estudo dos escoamentos turbulentos, este modelo também se mostra uma ferramenta valiosa que pode ser utilizada para avaliar a influência dos modelos de turbulência, combustão e radiação, bem como as técnicas de discretização e esquemas de acoplamento pressão-velocidade em escoamentos complexos, característicos das caldeiras de queima tangencial, principalmente quando mais dados experimentais estiverem disponíveis, como temperaturas das paredes de tubos da fornalha.

5.2. Recomendações de Trabalhos Futuros

Uma vez confirmada a presença do superaquecimento nos tubos da fornalha e identificados os pontos mais críticos, sugere-se, em continuidade a este trabalho, a realização de estudos mais detalhados visando avaliar os seguintes aspectos:

- Validação dos resultados contra dados de medição de temperatura nas paredes dos tubos (feita por termopares que serão instalados em futuro próximo) para propiciar avaliações quantitativas do escoamento;
- Avaliação de outros casos operacionais, incluindo a queima conjunta das quatro possíveis correntes de combustíveis: gás natural, metanol, gás ácido e gás residual;
- Modelagem dos dutos de ar secundário para estudar a influência do ângulo de entrada dessa corrente na formação do vórtice de chama;
- Aplicação de uma condição variável para o coeficiente de transferência de calor por convecção nas paredes da fornalha para representar mais fielmente a mudança no fluxo de calor em função da mudança do padrão do escoamento de água no interior dos tubos.

- Estudo de otimização das condições operacionais, alterando as características de entrada dos combustíveis e de ar, como pressão, temperatura e pressão para mitigar o problema de superaquecimento e determinar a melhor configuração de operação com relação à eficiência energética e vida útil do equipamento.

6. Referências Bibliográficas

- [1].LORA, E., E., S.; NASCIMENTO, M., A., R. **Geração Termelétrica: planejamento, projeto e operação**. Rio de Janeiro: Interciência, 2004. 2 v.
- [2].IEA, International Energy Agency. **Electricity generation by fuel - World**. 2013. Disponível em: <<http://www.iea.org/stats/WebGraphs/WORLD2.pdf>>. Acesso em: 31 ago. 2016.
- [3].GUBBA, S.R. et al. Numerical modelling of the co-firing of pulverised coal and straw in a 300 MWe tangentially fired boiler. **Fuel Processing Technology**, [s.l.], p. 181-188. 7 maio 2012.
- [4].ZHOU, Y. et al. Experimental and numerical study on the flow fields in upper furnace for large scale tangentially fired boiler. **Applied Thermal Engineering**, [s.l.], p. 732-739. 29 mar. 2008
- [5].HABIB, M. A. et al. Thermal and emission characteristics in a tangentially fired boiler model furnace. **International Journal of Energy Research**, [s.l.], p. 1164-1182. 14 dez. 2009.
- [6].HE, B. et al. Measured vorticity distributions in a model of tangentially fired furnace. Experimental. **Thermal and Fluid Science**, [s.l.], p. 537-554. 6 set. 2004.
- [7].HWANG, M. et al. Simulation studies on direct ash recycling and reburning technology in a tangentially fired 500 MW pulverized coal boiler. **Fuel**, [s.l.], p. 78-87. 28 maio 2013.
- [8]. TANG, G., et al. Numerical study of a tangentially fired boiler for reducing steam tube overheating. **Applied Thermal Engineering**. [s.l.], p. 261-271. 2016.
- [9].PATANKAR, S., V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Estados Unidos: Taylor&francis; 214 p. 1980.
- [10]. DIAS, F., L., G. 2014, **Análise do Uso de CFD para o Regime de Combustão Sem Chama Visível em uma Fornalha**. Tese de D.Sc. UNIFEI, Itajubá, MG Brasil.
- [11]. **STEAM, its generation and use: The Babcock & Wilcox Company**. The Babcock & Wilcox Company. 41. ed. Barberton, Ohio, Estados Unidos: J.b. Kitto And S.c. Stultz, 2005.

- [12]. VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction To Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. Nova York: Longman Scientific & Technical, 1995. 267 p.
- [13]. POPE, Stephen B. **Turbulent Flows**. Reino Unido: Cambridge University Press, 2000. 802 p.
- [14]. HOTTEL, H., C.; MCADAMS, W., H. **Radiation-Heat Transmission**. 3. ed. Nova York: Mcgraw-hill, 1954.
- [15]. ANSYS, Inc. **ANSYS Fluent Theory Guide 18.0**. Canonsburg: Ansys, 2017.
- [16]. BELOSEVIC, S. et al. Three-dimensional modeling of utility boiler pulverized coal tangentially fired furnace. **International Journal Of Heat And Mass Transfer**, [s.l.], p. 3371-3378. 15 nov. 2005.
- [17]. LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B., **Lectures in Mathematical models of turbulence**. London and New York, Academic Press Inc., 1972.
- [18]. LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering** v. 3, pp. 269 – 289. 1974.
- [19]. KUO, K.; ACHA, R. **Fundamentals of Turbulent and Multiphase Combustion**. Estados Unidos: John Wiley & Sons, Inc., 2012.
- [20]. YEOH, G. H.; YUEN, K. K., **Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering - Theory, Modelling and Practice**, 1ª ed, Academic Press, 2009.
- [21]. ESSS. **Introduction to Turbulence Modeling for CFD: Short Course**. Brasil: Esss, 2010. 105 p.
- [22]. KUNDU, P., K.; et al. **Fluid Mechanics**. 5. ed. Estados Unidos: Elsevier Inc., 2012. 919 p
- [23]. KOLMOGOROV, A. N., The equations of turbulent motion in an incompressible fluid. **Izvestia Academy of Science USSR, Physics**, v. 6, pp. 56 – 58, 1942.
- [24]. WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. DCW Industries, Inc. La Canada, California. 1998.
- [25]. MENTER, F. R., Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. **Journal of the American Institute of Aeronautics and Astronautics**, v. 32, pp. 1598 – 1605, 1994.

- [26]. ALENCAR, H. S., **Estudo Numérico da Termo-Aerodinâmica de Câmaras de Combustão para Turbinas a Gás: Aplicação ao caso de Micro Turbinas**. Tese de D.Sc., UNIFEI, Itajubá, Minas Gerais, 2007.
- [27]. FLOXCOM, Project., **Low-nox flameless oxidation combustor for high efficiency gas turbines**. Final Report, 2003. ITT – ISRAEL INSTITUTE OF TECHNOLOGY, Haifa, Israel, 2004. 50 p.
- [28]. HELLSTEIN, A., LAINE, S. Explicit algebraic Reynolds-Stress modelling in decelerating and separating flows. **Proceedings of the Fluids 2000 Conference and Exhibit**. AIAA p. 2000-2313. 2000.
- [29]. MENTER, F., R., ESCH, T. Heat Transfer Predictions using Advance Two Equation Turbulence Models. **EMC 2003, European Metallurgical Conference, Proceedings**, v. 3, p. 16-19, 2003.
- [30]. LAUNGTTRY, et al. Drag Prediction of engine-airframe interference effects with CFX-5. **Journal of Aircraft**, v. 42, pp. 1523 – 1529, 2005.
- [31]. LIBBY, P. A., WILLIAMS, F. A., **Fundamental aspects of turbulent reacting flows**. New York, Springer, 1980.
- [32]. LIBBY, P. A., WILLIAMS, F. A., **Turbulent reacting flows**. New York, Academic Press, 1994.
- [33]. WESTBROOK, C. K., **Computational Combustion**. In: Proceedings of the Combustion Institute, v. 30, pp. 125 – 157, 2005.
- [34]. MAGNUSSEN, B. F., HJERTAGER, B. H., On mathematical models of turbulent combustion with emphasis on soot formation and combustion. In: **Proceedings of the 16th Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute**, v. 16, n. 1, pp. 719 – 729, 2007.
- [35]. MAGNUSSEN, B. F., HJERTAGER, B. H., On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow. **19th AIAA Aerospace Science Meeting**, Jan. 12-15 1981, St.Louis, Missouri.
- [36]. MAGNUSSEN, B. F. The Eddy Dissipation Concept - A Bridge between Science And Technology. **ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion**, Lisbon, June 21-24, 2005.
- [37]. MODLINSKI, M. Computational modeling of a Utility Boiler Tangentially-Fired Furnace Retrofitted with Swirl Burners. **Fuel Processing Technology**. v. 91. P. 1601–1608. 2010.

- [38]. CHENG, P. Two-Dimensional Radiating Gas Flow by a Moment Method. **AIAA Journal**, v. 2. p. 1662–1664. 1964.
- [39]. SIEGEL, R., HOWELL, J. R. **Thermal Radiation Heat Transfer**. Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC. 1992.
- [40]. CHANDRASEKHAR, S., **Radiative Transfer**, 1^a ed., New York, Dover Publication, 1960.
- [41]. MATHUR, S., R., MURTHY, J., Y. Coupled Ordinates Method for multigrid acceleration of radiation calculations. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**. v. 13. p. 1783-1785. 1999.
- [42]. CHUI, E., H., RAITHBY, G., D. Computation of Radiant Heat Transfer on a Non-Orthogonal Mesh Using the Finite-Volume Method. **Numerical Heat Transfer, Part B**. v. 23. p. 269–288. 1993.
- [43]. LAÍN, S. et al. Experimental and Numerical Studies of the Hydrodynamics in a Bubble Column. **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 4913-4920, 1999.
- [44]. NOH, W. et al. SLIC (Simple Line Interface Calculation). **In proceedings of 5th International Conference of Fluid Dynamics, Lecture Notes in Physics**. v.59: p. 330–340, 1976.
- [45]. ISHII, M., **Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow**, 1^a ed., Paris, Eyrolles, 1975.
- [46]. SCHILLER, L., NAUMANN, A., A drag coefficient correlation. **Z. Ver. Deutsch. Ing**, v. 77, p. 318-320, 1935.
- [47]. MANNINEN, et al. On the mixture model for multiphase flow. **VTT Publications**. v. 288, Technical Research Centre of Finland. 1996.
- [48]. EL-BATSH, H. et al. On the application of mixture model for two-phase flow induced corrosion in a complex pipeline configuration. **Applied Mathematical Modelling**. v. 36. p.5686–5699. 2012.
- [49]. JAMBO, H., C., M. FOFANO, S. **Corrosão Fundamentos Monitoração e Controle**, 1^a ed., São Paulo, Ciência Moderna, 2008. 344 p.
- [50]. EDGAR, F. et al. Magnetite (Fe₃O₄) Heat capacity and thermodynamic properties from 5 to 350 K, low-temperature transition. **Journal of Chemical Thermodynamics**. p. 543-557. 1969
- [51]. NODA, Y., NAITO, K. The Thermal Conductivity and Diffusivity of Mn_xFe_{3-x}O₄ (0≤x≤1,5) from 200 to 700 K. **Netsukotei**. v. 5. p. 11-18. 1978

- [52]. TALER, J., TALER, D. Measurements of Local Heat Flux and Water-Side Heat Transfer Coefficient in Water Wall Tubes. **An Overview of Heat Transfer Phenomena**. cap. 1. InTech, 2012. 538 p.
- [53]. SMITH, G. P., et al. **GRI-Mech 3.0**. Berkeley, CA, 1999. Disponível em: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/. Acesso em: 24 out. 2017.
- [54]. HELD, T. J., DRYER, F. L., A Comprehensive Mechanism for Methanol Oxidation. **International Journal of Chemical Kinetics** v.30, p. 805-830. 1998.
- [55]. YAN, L., et al. Application of an efficient exponential wide band model for the natural gas combustion simulation in a 300 kW BERL burner furnace. **Applied Thermal Engineering**, v.94, p. 209-220. 2016.
- [56]. BILGER, R. W., STARNER, S. H. On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion in Nonpremixed Flames. **Combustion and Flame**. v. 80. p. 135-149. 1990.
- [57]. YALAMANCHILI, S. et al. Reduced Methanol Kinetic Mechanisms for Combustion Applications. **Combustion and Flame**. v. 142. p. 258–265. 2005.
- [58]. HIRSCHFELDER, J., O., CURTISS, C., F., BIRD, R., B. **Molecular Theory of Gases and Liquids**. John Wiley & Sons. New York. 1954.
- [59]. SMITH, T., F. et al. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. **Journal of Heat Transfer**, v. 104, p. 602-608, 1982.
- [60]. RICHARDSON, L. F. The Approximate Arithmetical Solution by Finite Differences of Physical Problems Involving Differential Equations, With an Application to the Stresses in a Masonary Dam. **Philos. Trans. R. Soc. London**, p. 307–357. 1910.
- [61]. RICHARDSON, L. F., GAUNT, J. A. “The Deferred Approach to the Limit. **Philos. Trans. R. Soc. London**, pp. 299–361. 1927
- [62]. SHARMA, S., PRASAD, S., Modelling of Non-Premixed Methane BERL Combustor through CFD Approaches and Prediction of Methane Burning. **International Journal of Latest Technology in Engineering, Management & Applied Science**, p. 68-71. 2011.
- [63]. AIAA, Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations. Reston, American Institute of Aeronautics and stronautics, **AIAA G-077**. 1998

- [64]. BAUKAL, C., E. **The Jonh Zink Hamworthy Combustion Handbook, Fundamentals**, 2° ed., v. 1, Taylor & Francis Group, LLC, 2013.
- [65]. HUA, Z., X., et al. Experimental study on heat transfer of supercritical water flowing upward and downward in 2x2 rod bundle with wrapped wire. **Annals of Nuclear Energy**. v. 111. p. 50–58. 2018.
- [66]. BABURIC, M. et al. Implementation of Discrete Transfer Radiation Method into Swift Computational Fluid Dynamic Code. **Thermal Science**. p. 19-28. maio 2014.
- [67]. WOLF, D. H. et al. “Jet Impingement Boiling”. **Advances in Heat Transfer**. West Lafayette, p. 1-132. jan. 1993.
- [68]. CELIK, I. B. et al. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **American Society of Mechanical Engineers**, v. 130, 2008.
- [69]. MANSUR, S. S. et al. **Turbulência - Volume 7**, 1ª ed., Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, 2010.
- [70]. FERZIGER, J. H., PERIC, M., **Computational Methods for Fluid Dynamics**, 3ª ed., New York, Springer, 2002.
- [71]. TURNS, S. R., **Introdução à combustão – Conceitos e aplicações**. 2 ed. McGraw-Hill Companies, Inc. 2000. 404 p.
- [72]. WARNATZ, J., et al. **Combustion: Physical and Chemical Fundamentals Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation**. 4 ed. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2006.
- [73]. COELHO, P., J. Advances in the discrete ordinates and finite volume methods for the solution of radiative heat transfer problems in participating media. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**. V. 145, 2014, p. 121-146.
- [74]. HOTTEL, H. C. e SAROFIM, A. F. **Radiative Transfer**, 1ª ed., New York, McGraw-Hill, 1967.
- [75]. MATHUR, S., R., MURTHY, J., Y. A Finite Volume Method For Radiative Heat Transfer Using Unstructured Meshes. **AIAA-98-0860**. January 1998.
- [76]. LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B. **Mathematical Models of Turbulence**. Academic Press, New York, 1972.
- [77]. ATHANASIOS, N. et al. Optimization of a log wood boiler through CFD simulation methods. **Fuel Processing Technology**, v. 137, p. 75-92. 2015.

- [78]. AL-ABBAS, A. et al. Numerical Modelling of Oxy-Fuel Combustion in a Full-Scale Tangentiallyfired Pulverised Coal Boiler. **Procedia Engineering** v. 56. p. 375 - 380. 2013.
- [79]. GRUBER, T. et al. Application of an Empirical Model in CFD Simulations to Predict the Local High Temperature Corrosion Potential in Biomass Fired Boilers. **Biomass and Bioenergy**, v. 79. p. 145-154. 2015.
- [80]. SHI, L. et al. Influence of combustion system retrofit on NO_x formation characteristics in a 300MW tangentially fired furnace. **Applied Thermal Engineering**. v. 98. p. 766–777. 2016.
- [81]. YEH ,C., Numerical investigation of the heat transfer and fluid flow in a Carbon Monoxide boiler. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. v. 55. p. 3601–3617. 2012.
- [82]. FORTUNA, A., O. **Tecnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos. Conceitos Basicos e Aplicagoes**. 1^a ed. São Paulo. Editora da Universidade de São Paulo. 2000.