



**UNIVERSIDADE TÉCNICA DE LISBOA**  
**INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO**

**ESTUDO EXPERIMENTAL E  
NUMÉRICO DE UM QUEIMADOR  
DE GÁS NATURAL**

Pedro Miguel Domingos de Azevedo  
(Licenciado)

*Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em  
Engenharia Mecânica*

***Orientação científica:***

Doutor João Miguel Pires Ventura

Doutora Isabel Maria Palma Aleixo Cabrita

***Constituição do Júri:***

Doutor Mário Nery Rodrigues Nina

Doutor Carlos Manuel Coutinho Tavares de Pinho

Doutor João Miguel Pires Ventura

Janeiro de 1999



---

# Resumo

## ***Estudo experimental e numérico de um queimador de gás natural***

Neste trabalho pretendeu-se demonstrar a aplicabilidade da modelação de dinâmica de fluídos, através de um código computacional (*Fluent/UNS*), para a previsão de escoamentos de fluidos e respectiva combustão, numa fornalha horizontal. Foi introduzido o gás natural como combustível, através da utilização de uma mistura com características idênticas às do gás natural. Foram realizados ensaios cromatográficos ao combustível para verificação da composição elementar.

Para a construção da malha computacional utilizada no modelo numérico, tornou-se necessária a utilização de dois programas, por forma a permitir a integração dos 37 injectores, respeitantes ao queimador, na face da fornalha. Foi escolhida uma malha com cerca de 78000 células, que garante a independência dos resultados. Para modelação do escoamento foi utilizado o modelo de turbulência  $k-\epsilon$ , por se adequar melhor ao escoamento em causa, bem como pelas exigências computacionais. A transferência de calor por radiação, no interior da fornalha, é calculada através da utilização do *Modelo de Radiação de Transferência Discreta (DTRM)*.

Os resultados numéricos foram validados por ensaios experimentais, realizados com um queimador protótipo montado numa fornalha horizontal, cujos resultados foram analisados juntamente com os homólogos numéricos.

## ***Palavras-chave:***

Dinâmica de fluídos computacional; Modelos numéricos; Turbulência; Combustão; Radiação; e Gás natural.

---

# *Abstract*

## ***Experimental and numerical study of a natural gas burner***

The objective of this work was to demonstrate the applicability of computational fluid dynamics, using a computational package (*Fluent/UNS*) to the prediction of the flow and combustible fields in a horizontal furnace.

To construct the computational mesh several programs were used, in order to integrate the burner's 37 injectors on the furnace front face. A mesh with about 78000 cells was selected, to ensure the independence of the results.

Turbulence modelling was carried out using  $k$ - $\varepsilon$  model and radiative heat transfer in the furnace was evaluated through the application of the *Discrete Transfer Radiation Model (DTRM)*.

The results of 15 experimental runs, carried out in a horizontal furnace, equipped with a prototype burner, were used to validate numerical predictions.

## ***Key-words:***

Computational fluid dynamics; Numerical models; Turbulence; Combustion; Radiation; and Natural gas.

---

# *Agradecimentos*

Não são poucas as pessoas a quem deveria endereçar o meu reconhecimento pela sua contribuição para o trabalho aqui apresentado. Visto não ser pratico todas mencionar, destaco, apenas, as mais influentes, na realização deste trabalho.

Em primeiro lugar, quero expressar o meu agradecimento ao Prof. João Ventura pela disponibilidade para a orientação da dissertação e por todos os esclarecimentos prestados às minhas dúvidas, que conduziram à resolução de partes importantes deste trabalho.

À Doutora Isabel Cabrita, pela co-orientação da dissertação, e ao Doutor Ibrahim Gulyurtlu, bem como a todas as pessoas do Departamento de Tecnologias da Combustão do INETI, por colocarem à disposição os meios existentes para o desenvolvimento deste trabalho, mas principalmente, por todo o apoio prestado durante a sua realização.

Ao Eng. Rui André e ao Eng. Teodoro Trindade, a preciosa colaboração prestada, algumas das vezes durante o café, na resolução das muitas dificuldades colocadas por um trabalho deste tipo.

Aos Manos e aos Camonianos pelo estímulo e compreensão que nunca me negaram.

E, por fim, aos meus pais, por todo o apoio prestado.

---

# Índice

<i>Resumo</i>	<i>iii</i>
<i>Abstract</i>	<i>iv</i>
<i>Agradecimentos</i>	<i>v</i>
<i>Índice</i>	<i>vi</i>
<i>Lista de figuras</i>	<i>ix</i>
<i>Lista de quadros</i>	<i>xvii</i>
<i>Simbologia</i>	<i>xx</i>
<i>1 Introdução</i>	<i>1</i>
1.1 Tema e objectivos da tese	3
1.2 Modelação de escoamentos	4
1.3 Modelação da fornalha	8
1.4 Meios disponíveis	8
1.5 Organização da dissertação	10
<i>2 Método numérico</i>	<i>12</i>
2.1 Equações de Navier-Stokes	12
2.1.1 Equação de conservação da massa	13
2.1.2 Equação de conservação do momento	13
2.2 Modelação da turbulência	14
2.2.1 Modelo k- $\epsilon$	15
2.2.2 Modelo RNG	17
2.2.3 Modelo RSM	19
2.3 Modelação da radiação	22
2.3.1 Modelo DTRM	26
2.3.2 Modelo P-1	27
2.3.3 Modelo de Rosseland	29
2.4 Modelação da combustão	30
2.4.1 Modelo 1 – Mecanismo de passo único	31
2.4.2 Modelo 2 – Mecanismo de duplo passo	33
2.4.3 Modelo 3 – Mecanismo de duplo passo multi-percursor	35
2.5 Processo de cálculo	38
2.6 Sumário	42

---

3	<i>Caracterização das espécies químicas</i>	43
3.1	<i>Análise do combustível</i>	43
3.2	<i>Propriedades das espécies químicas</i>	48
3.2.1	<i>Massa específica</i>	49
3.2.2	<i>Viscosidade</i>	49
3.2.3	<i>Difusividade mássica</i>	50
3.2.4	<i>Conductividade térmica</i>	52
3.2.5	<i>Calor específico</i>	53
3.3	<i>Sumário</i>	55
4	<i>Instalação experimental</i>	56
4.1	<i>Sistema de alimentação</i>	57
4.1.1	<i>Combustível</i>	58
4.1.2	<i>Redutores</i>	59
4.1.3	<i>Rotâmetros</i>	60
4.2	<i>Queimador</i>	61
4.3	<i>Fornalha</i>	63
4.4	<i>Sistema de refrigeração</i>	65
4.5	<i>Analísadores</i>	66
4.6	<i>Aquisição de dados</i>	68
4.7	<i>Sumário</i>	69
5	<i>Ensaio para validação do modelo numérico</i>	70
5.1	<i>Condições de funcionamento</i>	71
5.2	<i>Análise dos gases de combustão</i>	73
5.3	<i>Transmissão de calor</i>	78
5.4	<i>Sumário</i>	82

---

6	<i>Parâmetros de modelação</i>	83
6.1	<i>Malha computacional</i>	83
6.2	<i>Escoamento isotérmico</i>	90
6.3	<i>Escoamento adiabático</i>	98
6.3.1	<i>Radiação</i>	100
6.3.1.1	<i>Discretização da energia radiante</i>	103
6.4	<i>Escoamento reactivo</i>	109
6.5	<i>Sumário</i>	116
7	<i>Ensaio numéricos</i>	118
7.1	<i>Balanço elementar</i>	118
7.2	<i>Balanço energético</i>	132
7.2.1	<i>Coefficiente de absorção</i>	132
7.2.2	<i>Emissividade externa de radiação</i>	135
7.3	<i>Sumário</i>	142
8	<i>Conclusões</i>	143
8.1	<i>Contribuição da dissertação</i>	145
8.2	<i>Sugestões para trabalho futuro</i>	146
	<i>Referências bibliográficas</i>	148



---

# *Lista de figuras*

## ***Capítulo I***

- 1.1 Vista da malha da fornalha, apenas com as superfícies exteriores visíveis. 6
- 1.2 Informações sobre o principal *software* utilizado. 9

## ***Capítulo II***

- 2.1 Transferência de calor por radiação. 24
- 2.2 Razão entre as constantes utilizadas para o cálculo da velocidade nas *Reacções VI e VII* em função da temperatura. 37
- 2.3 Esquema do processo de resolução de um problema. 39
- 2.4 Evolução típica dos resíduos normalizados de algumas equações. 42

## ***Capítulo III***

- 3.1 Variação da viscosidade em função da temperatura. 50
- 3.2 Variação da difusividade mássica em função da temperatura. 51
- 3.3 Variação da conductividade térmica em função da temperatura. 53
- 3.4 Variação do calor específico em função da temperatura. 54

## ***Capítulo IV***

- 4.1 Vista geral da instalação utilizada para a realização da parte experimental deste trabalho. 56
- 4.2 Esquema geral da instalação. 57

---

4.3	Garrafas de combustível com os mano-redutores instalados.	59
4.4	Rotâmetros para controle dos caudais admitidos na fornalha.	61
4.5	Queimador protótipo.	62
4.6	Posição e dimensão dos injectores.	62
4.7	Fornalha com queimador instalado.	63
4.8	Esquema da fornalha.	64
4.9	Plataforma para trabalhos na chaminé.	65
4.10	Bomba para circulação da água de refrigeração.	66
4.11	Analísadores utilizados para monitorização dos gases de combustão.	67
4.12	Sistema de aquisição de dados.	68

## ***Capítulo V***

5.1	Excesso de ar utilizado nos ensaios de validação realizados, por ordem decrescente de excesso de ar.	71
5.2	Entrada de ar secundário na fornalha, em função do excesso de ar corrigido.	73
5.3	Diagrama de Ostwald, com base em valores provenientes do <i>Ensaio 14</i> .	75
5.4	Concentração de O <sub>2</sub> nos gases de combustão (base seca) em função do excesso de ar.	75
5.5	Concentração de CO <sub>2</sub> nos gases de combustão (base seca) em função do excesso de ar.	76

---

5.6	Concentração de CO nos gases de combustão (base seca) em função do excesso de ar.	76
5.7	Concentração de O <sub>2</sub> nos gases de combustão (base seca) em função da temperatura dos gases de combustão.	77
5.8	Concentração de CO <sub>2</sub> nos gases de combustão (base seca) em função da temperatura dos gases de combustão.	77
5.9	Concentração de CO nos gases de combustão (base seca) em função da temperatura dos gases de combustão.	78
5.10	Principais parâmetros monitorizados pelo sistema de aquisição de dados (valores provenientes do <i>Ensaio 15</i> ).	79
5.11	Potência calorífica transmitida à água, em função do excesso de ar.	80
5.12	Potência calorífica transmitida à água, em função da temperatura dos gases de combustão.	81
5.13	Temperatura dos gases de combustão em função do excesso de ar.	81

## ***Capítulo VI***

6.1	Malha de 31 067 células adaptada à geometria da fornalha.	85
6.2	Perspectiva da malha computacional em alguns dos planos usados na comparação dos resultados numéricos das simulações.	85
6.3	Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	86
6.4	Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota <i>k045</i> , em função da distância radial ao centro.	86

---

6.5	Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota <i>k075</i> , em função da distância radial ao centro.	87
6.6	Comparação da componente transversal da velocidade, entre as três malhas, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	87
6.7	Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota <i>k045</i> , em função da distância radial ao centro.	88
6.8	Velocidade em cada célula, em função do volume da célula, na malha de 31 067 células.	89
6.9	Velocidade em cada célula, em função do volume da célula, na malha de 78 003 células.	89
6.10	Velocidade em cada célula, em função do volume da célula, na malha de 120 000 células.	90
6.11	Velocidade em X em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k015</i> .	91
6.12	Velocidade em X em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k025</i> .	91
6.13	Velocidade em Y em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k015</i> .	92
6.14	Velocidade em Y em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k025</i> .	92
6.15	Velocidade em Z em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k015</i> .	93
6.16	Velocidade em Z em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k025</i> .	93
6.17	Comparação da Velocidade Resultante com a Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k015</i> .	94
6.18	Comparação da Velocidade Resultante com a Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k025</i> .	95
6.19	Viscosidade, em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k015</i> .	96

---

---

6.20	Viscosidade, em função da distância radial ao queimador, na cota <i>k075</i> .	96
6.21	Contornos de velocidade (VR) em escoamento isotérmico e em escoamento com combustão, para cada modelo de turbulência.	99
6.22	Perfil da fracção molar da espécie $O_2$ no escoamento adiabático.	99
6.23	Perfil da fracção molar da espécie $CO_2$ no escoamento adiabático.	100
6.24	Discretização da energia radiante (em geometria circular para melhor visualização).	101
6.25	Iso-linhas de temperatura em escoamento adiabático com e sem os vários modelos de radiação.	102
6.26	Velocidade resultante dos diversos modelos de radiação, na cota <i>k025</i> , em função da distância radial ao centro.	103
6.27	Temperatura resultante dos diversos modelos de radiação, na cota <i>k025</i> , em função da distância radial ao centro.	103
6.28	Iso-linhas de temperatura com utilização de diferente número de raios no modelo <i>DTRM</i> .	104
6.29 e 6.30	Ângulos $\theta$ e $\phi$ a definir o ângulo sólido hemisférico do Ponto P, bem como a direcção da emissão e o seu ângulo sólido, respectivamente.	105
6.31	Espaço ocupado pelos ficheiros de raios em função do número de direcções discretas de radiação.	106
6.32	Fracção molar do oxigénio na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao queimador.	108
6.33	Fracção molar do dióxido de carbono na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao queimador.	108
6.34	Velocidade resultante na fornalha, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	109

---

---

6.35	Temperatura na fornalha, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	110
6.36	Percentagem de oxigénio na fornalha, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	110
6.37	Percentagem de dióxido de carbono na fornalha, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	111
6.38	Percentagem de monóxido de carbono na fornalha, na cota <i>k015</i> , em função da distância radial ao centro.	112
6.39	Iso-linhas da fracção molar de $O_2$ , para cada um dos modelos de combustão, no plano <i>srf007</i> .	113
6.40	Iso-linhas da fracção molar de $CO_2$ , para cada um dos modelos de combustão, no plano <i>srf007</i> .	114
6.41	Iso-linhas de temperatura, para cada um dos modelos de combustão, nos planos <i>srf007</i> e <i>srf015</i> .	115

## ***Capítulo VII***

7.1	Comparação dos teores de $CO_2$ (em base seca) à saída da fornalha, obtidos por medição experimental e por previsão, segundo o modelo proposto.	119
7.2	Comparação dos teores de $O_2$ (em base seca) à saída da fornalha, obtidos por medição experimental e por previsão, segundo o modelo proposto.	119
7.3	Comparação dos teores de $CO$ (em base seca) à saída da fornalha, obtidos por medição experimental e por previsão, segundo o modelo proposto.	120
7.4	Fracções molares dos principais constituintes dos gases de combustão (em base húmida) em função do valor da propriedade emissividade externa.	121

---

7.5	Fracção molar da espécie química CH <sub>4</sub> , para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	122
7.6	Fracção molar da espécie química CH <sub>4</sub> , para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	123
7.7	Fracção molar da espécie química CO, para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	124
7.8	Fracção molar da espécie química CO, para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	125
7.9	Fracção molar da espécie química CO <sub>2</sub> , para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	126
7.10	Fracção molar da espécie química CO <sub>2</sub> , para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	127
7.11	Fracção molar da espécie química H <sub>2</sub> O, para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	128
7.12	Fracção molar da espécie química H <sub>2</sub> O, para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	129
7.13	Fracção molar da espécie química O <sub>2</sub> , para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	130
7.14	Fracção molar da espécie química O <sub>2</sub> , para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.	131
7.15	Perfis de temperatura dos gases de combustão em <i>srf015</i> , <i>srf030</i> , <i>srf045</i> , <i>srf060</i> e <i>srf075</i> , com $a = 0$ .	134
7.16	Perfis de temperatura dos gases de combustão em <i>srf015</i> , <i>srf030</i> , <i>srf045</i> , <i>srf060</i> e <i>srf075</i> , com $a = \text{WSGGM}$ .	134
7.17	Comparação da temperatura dos gases de combustão à saída da fornalha obtidos por medição experimental e por previsão, segundo diferentes valores assumidos pelo parâmetro emissividade externa de radiação.	136

---

---

7.18	Comportamento da energia perdida pelas paredes da fornalha em função do parâmetro de emissividade externa de radiação adotado.	137
7.19	Comparação da Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota <i>k015</i> .	137
7.20	Comparação da Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota <i>k030</i> .	138
7.21	Comparação da temperatura máxima, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota <i>k015</i> .	138
7.22	Comparação da temperatura máxima, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota <i>k030</i> .	139
7.23	Comparação da temperatura máxima, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota <i>k045</i> .	139
7.24	Fracção molar da espécie CO <sub>2</sub> para diferentes valores do parâmetro emissividade externa de radiação (0,00 a 0,08), corte longitudinal.	140
7.25	Fracção molar da espécie O <sub>2</sub> para diferentes valores do parâmetro emissividade externa de radiação (0,00 a 0,08), corte longitudinal.	141



---

# *Lista de quadros*

## **Capítulo I**

- 1.1 Características das máquinas utilizadas para a realização deste trabalho. 9

## **Capítulo II**

- 2.1 Constantes do modelo  $k-\varepsilon$ . 17
- 2.2 Termos relacionados com a curvatura do escoamento no modelo *RSM* onde  
$$B \equiv \left( \frac{1}{r^2} \partial_{\theta} \mu_t \right) + \frac{2\mu_t}{r^2} \partial_{\theta}.$$
 20
- 2.3 Energias produzidas pelas *Reacções II e III*. 34
- 2.4 Parâmetros cinéticos da *Reacção III* para o cálculo da velocidade reacional determinada segundo a *Equação 2.54*. 34
- 2.5 Parâmetros cinéticos (*Equação 2.55*) para as reacções de combustão do modelo de duplo passo multi-percursor (Westbrook e Dryer, 1981), com as unidades em m-sec-kgmol-J-Kelvin. 36

## **Capítulo III**

- 3.1 Composição elementar de diferentes tipos de gás natural e suas proveniências geográficas. 44
- 3.2 Composição e algumas características do Gás Natural de referência. 45
- 3.3 Composição do gás combustível utilizado. 46
- 3.4 Resultados do cromatograma nº 1. 46
- 3.5 Resultados do cromatograma nº 2. 47

---

3.6	Resultados do cromatograma nº 3.	47
3.7	Comparação das diversas composições, quer analisadas quer fornecidas pela Transgás e Ar Líquido.	48
3.8	Parâmetros polinomiais para cálculo da viscosidade das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.	49
3.9	Parâmetros polinomiais para estimativa do coeficiente de difusão mássica das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.	51
3.10	Parâmetros polinomiais para estimativa da condutividade térmica das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.	52
3.11	Parâmetros polinomiais para estimativa do calor específico das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.	54

#### ***Capítulo IV***

4.1	Composição do gás natural de referência.	58
4.2	Composição do gás combustível utilizado.	58
4.3	Características dos redutores.	60
4.4	Características dos rotâmetros.	60
4.5	Áreas de passagem de fluido para o interior da câmara de combustão.	63
4.6	Características dos analisadores de gases.	67

#### ***Capítulo V***

5.1	Condições à entrada da fornalha.	72
-----	----------------------------------	----

---

5.2	Composição e temperatura dos gases (base seca) à saída da câmara de combustão, sem correcção.	74
5.3	Composição e temperatura dos gases (base seca) à saída da câmara de combustão, após correcção.	74
5.4	Calor transmitido à água de arrefecimento da fornalha.	79

## ***Capítulo VI***

6.1	Comparação do esforço computacional médio para a resolução numérica de um escoamento turbulento em condições isotérmicas.	98
6.2	Fracção molar (%) das espécies químicas na chaminé da fornalha para cada modelo de turbulência, com escoamento adiabático.	100
6.3	Espaço ocupado em disco pelos ficheiros de raios utilizados no estudo de discretização da energia radiante.	106
6.4	Temperaturas máximas e de saída dos gases com diferentes números de raios utilizados	107
6.5	Composição média dos gases na chaminé.	107
6.6	Temperatura e composição média (%) dos gases na chaminé, segundo os três modelos de combustão.	112

---

# *Sistema de unidades*

Dada a grande variedade de simbologia utilizada neste trabalho, e como frequentemente o mesmo caracter pode ser utilizado para designar diferentes propriedades, para evitar ambiguidades, optou-se por descrever ao longo do texto o significado das variáveis. Desta forma resta enunciar o sistema de unidades utilizado. Todas as variáveis são expressas no sistema S.I., excepto o ângulo, e sempre que tal não aconteça, a indicação das unidades é feita explicitamente. Seguidamente são listadas as propriedades de mais comum utilização no texto com as respectivas unidades.

<i>Massa</i>	kg
<i>Comprimento</i>	m
<i>Tempo</i>	s
<i>Velocidade</i>	m.s <sup>-1</sup>
<i>Força</i>	N
<i>Aceleração</i>	m.s <sup>-2</sup>
<i>Energia</i>	J
<i>Potência</i>	W
<i>Caudal mássico</i>	kg.s <sup>-1</sup>
<i>Temperatura</i>	K
<i>Entalpia</i>	J.kg <sup>-1</sup>
<i>Pressão</i>	Pa
<i>Massa específica</i>	kg.m <sup>-3</sup>
<i>Viscosidade</i>	kg.m <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup>
<i>Energia cinética turbulenta</i>	m <sup>2</sup> .s <sup>-2</sup>
<i>Velocidade de dissipação da energia</i>	m <sup>2</sup> .s <sup>-3</sup>
<i>Calor específico</i>	J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
<i>Condutividade térmica</i>	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
<i>Difusividade</i>	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
<i>Energia de activação</i>	J.kmol <sup>-1</sup>
<i>Ângulo</i>	graus
<i>Caudal volumétrico</i>	m <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup>
<i>Área</i>	m <sup>2</sup>
<i>Factor de Arrhenius</i>	Unidades consistentes

---

# Capítulo I

## ***1 Introdução***

As obrigações, de todos os sectores da sociedade, para com o meio ambiente são cada vez mais claras. Neste sentido, as estratégias e políticas de desenvolvimento definidas pela União Europeia têm-se adaptado à preocupação crescente no domínio ambiental, o que tem permitido que acordos globais de protecção do ambiente tenham sido estabelecidos a nível internacional. Devido ao seu impacto no ambiente, o sector energético foi definido como um dos sectores chave a ter em atenção.

A crescente preocupação com o ambiente criou não só o desafio como a oportunidade da introdução do gás natural no mercado de energia, o que tem permitido o crescimento contínuo do seu consumo a nível mundial. Tendo sido introduzido recentemente no nosso país, o gás natural tornou-se uma alternativa energética pelo que é importante analisarmos as vantagens e desvantagens que este combustível pode representar, comparativamente aos outros combustíveis maioritariamente utilizados no país e no mundo.

Todas as formas de energia têm impacto sobre o meio ambiente através dos seus diferentes ciclos de vida, durante a exploração, a produção, o transporte, o armazenamento, a distribuição e o uso final. Os efeitos variam de um combustível para o outro e para cada etapa do ciclo de vida de cada um. Os efeitos sobre o meio ambiente podem dar-se em cada um dos meios afectados, aquático, terrestre ou atmosférico e podem ter lugar: à escala local (ruído, nevoeiro químico ou “smog” e alterações na paisagem); à escala nacional ou transnacional (chuva ácida); e à escala global (aquecimento global e diminuição da camada de ozono).

A queima de produtos combustíveis liberta energia e produz essencialmente dióxido de carbono e água, embora se encontrem outros compostos em maior ou menor quantidade, dependendo das condições em que se processa a combustão, como o monóxido de carbono, óxidos de azoto (NO<sub>x</sub> e N<sub>2</sub>O), óxidos de enxofre, hidrocarbonetos inqueimados, etc (Cabrita, 1994).

O gás natural encontra-se na natureza, nas chamadas “bolsas de gás”, que são jazidas naturais subterrâneas cobertas por estratos impermeáveis que impedem a sua saída para o exterior. Devido às suas características naturais, este combustível é uma fonte de energia primária pronta a ser consumida no seu estado de origem, sem transformação ou qualquer outro processo industrial.

Comparando com outros combustíveis alternativos, particularmente o fuelóleo, o carvão e o gasóleo, o gás natural apresenta vantagens inerentes à sua composição química. Visto que é praticamente isento de enxofre, o que traz vantagens a nível energético, entre as quais se pode mencionar a mais fácil recuperação da energia contida no calor sensível dos gases de combustão, que, por não produzir emissões de óxidos de enxofre (Cabrita, 1996), não resulta na formação de sulfato de hidrogénio (vulgo ácido sulfúrico). Esta consequência, permite que os gases de combustão sejam expelidos para a atmosfera com valores de temperatura abaixo dos 160 ~ 170 °C, considerado o ponto de orvalho dos gases de combustão para fuelóleo com 3,5 % de enxofre (Neves *et al.*, 1986).

A situação acima mencionada, verifica-se no gás natural que está a ser fornecido para Portugal, proveniente do campo de gás de Hassi R'Mel, na Argélia, onde o teor de enxofre chega mesmo a ser nulo, com baixo teor de azoto e com elevado teor de metano, e cujo estado físico, na natureza, é gasoso, o que permite uma combustão mais limpa.

O possível aumento aparente de custos, resultante do menor rendimento, não provoca um aumento global dos mesmos, pois não existem certos custos que estão normalmente associados à utilização de fuelóleo, tais como: o transporte; o aquecimento dos tanques; o aquecimento das condutas de combustível; a bombagem do combustível; a atomização; a manutenção do equipamento; o armazenamento; a limpeza; e os aditivos. Torna-se, então, necessário levar em consideração que todas as operações acima mencionadas representam um custo adicional que se pode situar entre os 5,3 e os 12% (“Tecnologias do gás natural na indústria do vidro”, 1998) ou até superiores (Quirk e Norman, 1998) e que deve ser adicionado ao preço de compra do fuelóleo.

É de notar que devido a uma menor emissividade de uma chama de gás natural, a temperatura adiabática de chama, bem como a de funcionamento normal, é mais elevada, visto que existe uma menor transferência de calor através do fenómeno de radiação. Esta situação origina um aumento das emissões de óxidos de azoto, que podem chegar a valores superiores em cerca de 60 % (Roca,

1998), relativamente à utilização de fuelóleo. Posto isto, verifica-se ser de relevante importância, para a Investigação & Desenvolvimento, o estudo de queimadores que produzam baixas emissões de  $\text{NO}_x$ .

Com a disponibilização do gás natural como combustível canalizado, em Portugal, verifica-se a necessidade de estudar os efeitos da sua implementação na indústria, por forma a aumentar o *know-how* existente sobre o gás natural, a sua viabilidade económica, a aplicabilidade deste combustível aos processos industriais, as tecnologias disponíveis e os estudos de outras tecnologias novas, adequadas ao panorama nacional, bem como otimizar a utilização deste combustível até nos colocarmos ao nível dos nossos parceiros.

### ***1.1 Tema e objectivos da tese***

Em termos experimentais, a disponibilidade de uma fornalha calorimétrica horizontal, que utilizava óleos usados como combustível levou à tentativa de conversão desta para o consumo de gás natural. Assim, todo o processo relativo à conversão, desde os cálculos à aquisição de equipamento, se revelou como grande oportunidade para adquirir alguma experiência, nesta área, na escolha e compra dos equipamentos, bem como na sua montagem, regulação e utilização.

A utilização de técnicas cada vez mais sofisticadas na previsão do comportamento de sistemas de combustão é presentemente uma realidade. No entanto, não tem sido muito vulgar encontrar a modelação de sistemas de combustão completos como a fornalha aqui estudada, devido às grandes necessidades de memória para cálculo, de velocidade de processamento e, até, de espaço de armazenamento para os resultados.

Assim, a construção de um modelo numérico de simulação da combustão de gás na totalidade da câmara de combustão de uma fornalha, tendo como base a dinâmica de fluidos, surgiu como um desafio aliciante, por incluir uma parte experimental e uma parte numérica, onde é possível tomar contacto com uma realidade, que não poucas vezes, passa despercebida durante a realização de trabalhos experimentais, entre os quais se encontram os parâmetros de determinados fenómenos, como: a energia de activação e o factor pré-exponencial, na cinética reaccional; estimativa e pesquisa bibliográfica de propriedades, das diversas espécies químicas envolvidas no processo de combustão, em função da temperatura; e, no que respeita ao cálculo numérico, os parâmetros a

utilizar, como a escolha dos modelos de turbulência e de radiação e, neste último caso, quais os respectivos parâmetros de funcionamento.

O objectivo último deste trabalho é propor um modelo numérico simplificado de previsão das características de escoamento de um fluido reactivo no interior de uma fornalha calorimétrica. Pretende-se deste modo apresentar os resultados obtidos em diferentes condições de funcionamento, de modo a caracterizar não só os perfis de escoamento do fluido, mas também algumas limitações e problemas numéricos decorrentes da aplicação do método. Para tal serão utilizadas três malhas de diferentes complexidades (reticulação do domínio de cálculo), para garantir a independência dos resultados. A primeira com cerca de 30000 células, com o fim de se proceder à definição dos parâmetros numéricos de funcionamento, a segunda com cerca de 78000 células e a terceira com cerca de 120000. Os resultados obtidos serão comparados com os valores obtidos por via experimental.

## ***1.2 Modelação de escoamentos***

A mecânica de fluidos, entendida como modernamente a conhecemos, surgiu no século XVII quando Newton estabeleceu as leis do movimento, para os sólidos. Algum tempo depois, em 1755, Leonhard Euler aplicou essas leis a um elemento fluido, estabelecendo as equações diferenciais básicas do movimento dos fluidos. Estas equações estavam, no entanto, limitadas a um fluido perfeito, no qual não existem tensões de corte. Só posteriormente, em 1827, as equações do movimento para fluidos newtonianos foram generalizadas por Navier, e mais tarde, em 1845, por Stokes, para incluir as tensões de corte, e, portanto, contabilizar o atrito. Desde a sua formulação que existiram objecções às equações de Navier-Stokes. A queda de pressão numa conduta, obtida a partir destas equações indicava a sua variação linear com a velocidade, porém os resultados experimentais mostravam que sob certas condições essa relação era verificada, enquanto que sob outras, a variação se aproximava mais da raiz quadrada da velocidade. Por observação directa do escoamento de fluidos, Osborne Reynolds, em 1883, sugeriu a existência de dois tipos de escoamentos, o laminar e o turbulento. Reynolds estabeleceu que as equações de Navier-Stokes eram, também, aplicáveis a escoamentos turbulentos desde que fosse contabilizada a natureza aleatória e não estacionária dos fluxos.

O avanço significativo subsequente foi enunciado por Prandtl, em 1904, ao reconhecer que os padrões de escoamento de um fluido deveriam ser divididos em duas regiões, uma na vizinhança



das superfícies sólidas, e outra para o restante fluido. Para a denominada “*camada limite*”, o efeito da viscosidade foi identificado como determinante do seu comportamento, enquanto que o restante fluido poderia, em muitos casos, ser tratado como um fluido perfeito. A formulação do conceito da camada limite, marcou o início do mais frutífero período da mecânica dos fluidos, durante o qual foram desenvolvidas inúmeras técnicas experimentais e analíticas. Theodore von Kármán, nos Estados Unidos, e Geoffrey Taylor, em Inglaterra, foram os principais impulsionadores desta fase (Trindade, 1996).

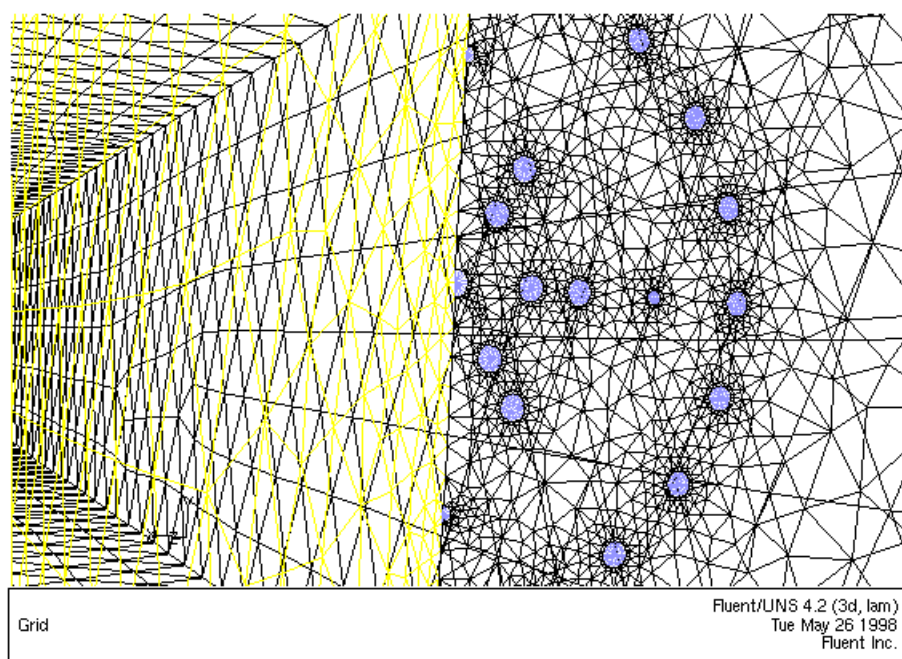
Mais recentemente, os computadores tiveram um impacto significativo no desenvolvimento da mecânica dos fluidos. Em muitos casos, as equações de Navier-Stokes podem ser resolvidas numericamente para obtenção dos perfis de escoamento de fluidos em regime laminar, tendo-se igualmente obtido progressos assinaláveis na obtenção da solução para escoamentos turbulentos. O facto do computador permitir a resolução de equações muito complexas, desvaloriza a utilização de hipóteses simplificativas de menor rigor, o que, certamente, terá um efeito decisivo na forma como os problemas de mecânica de fluidos serão abordados no futuro.

As equações de Navier-Stokes e da continuidade têm sido amplamente utilizadas por engenheiros na previsão de fenómenos de transferência de calor, massa e momento. Tais equações são a essência da denominada “Dinâmica de Fluidos Assistida por Computador” (*CFD – Computational Fluid Dynamics*). Pelas suas potencialidades, esta ferramenta pode tornar-se, em breve, indispensável a engenheiros que desenvolvam trabalho na análise de processos, assim como na investigação e projecto de equipamento. Esta técnica computacional não é, ainda, de fácil utilização, como o poderá comprovar qualquer engenheiro que a tenha tentado usar. Recentemente, algumas empresas construtoras de *software* (Computacional Dynamics Ltd, Fluid Dynamics Intl, Fluent Ltd, Siemens AG, Cham Ltd, etc.), têm desenvolvido esforços significativos na criação de interfaces interactivas de modo a tornar este tipo de códigos mais “*user friendly*”, ou seja, introduzir na sua utilização esquemas lógicos que sejam intuitivos aos utilizador.

Além de difícil utilização, esta técnica é, também, bastante demorada, muitas simulações requerem vários dias de cálculo. De modo a simplificar o esforço matemático envolvido no cálculo, os códigos de *CFD* baseiam-se em aproximações de elementos ou volumes finitos. É na construção da malha de cálculo (reticulação do domínio de cálculo) para representar o equipamento em análise (*Figura 1.1*) que se coloca, em muitos casos, o mais complexo desafio. Adicionalmente, a

necessidade de possuir potentes (e caros) computadores para a resolução, através de *CFD*, mesmo dos casos mais simples, retira, praticamente, toda a possibilidade de difusão desta técnica.

Comparado com outros códigos computacionais para engenharia, tais como os simuladores de processo (“*process flowsheet*”), ou pacotes de *CAD*, a utilização de *CFD* está, ainda, numa fase incipiente. A maior vantagem destes códigos é a possibilidade de visualização dos padrões de escoamento de fluidos para diferentes configurações de equipamento, o que permite eliminar a necessidade de construção de modelos à escala. Segundo a técnica *CFD*, o equipamento em estudo é dividido num número finito de “células computacionais” (áreas ou volumes de controle), e as equações diferenciais para o fluido são convertidas na forma algébrica por integração sobre toda a célula.



*Figura 1.1:* Vista da malha da fornalha, apenas com as superfícies exteriores visíveis.

Um caso medianamente complicado pode requerer bem mais de 50000 células (*Figura 1.1*) o que representa a resolução de, aproximadamente, 1/2 milhão de equações por iteração. Embora um número de células elevado possa advir quer de um volume grande, quer de uma discretização significativa do detalhe. Um modelo de combustão complexo, com várias reacções para o

descrever, vai influenciar quer o número de equações a resolver por célula, quer o número de células, que se necessita elevado para discretizar convenientemente o processo.

A construção da malha de cálculo (“*mesh generation*”), é igualmente um processo demorado, tomando, tipicamente, 30 a 50 % do tempo necessário à implementação da simulação (Fouhy e Parkinson, 1995). No entanto, existem em curso tentativas de ligação dos códigos *CFD* a sistemas *CAD*, uma vez que a criação automática de malhas de cálculo poderá ser a chave para a difusão desta técnica, através da importação da geometria dos objectos a partir de um desenho em *CAD*. Esta possibilidade já é considerada na última versão dos códigos comercializados pelas empresas Fluent Inc. e Fluid Dynamics Intl. A reticulação do domínio de cálculo foi, de igual forma, bastante simplificada com a utilização de malhas não estruturadas com base em elementos triangulares e tetraédricos.

A redução do tempo de cálculo necessário para a resolução dos casos não se pode basear na simplificação do algoritmo, mas, em vez disso, na sua optimização. No entanto esta vertente não conduzirá, certamente, a alterações significativas, uma vez que a tendência é incluir no código de *CFD* um maior número de modelos, o que, necessariamente, torna o programa mais lento. A tendência parece ser a utilização de supercomputadores e, em simultâneo, o melhoramento de algumas características específicas da máquina. A atribuição de sectores de memória (“*memory allocation*”) exclusivamente dedicados a certas operações, permite uma gestão mais eficiente dos recursos, o que tem produzido bons resultados. Porém, a velocidade de acesso à memória, que é um factor limitativo, e a existência de conflitos no processamento de dados, parecem ser a via de melhoramento da máquina, visto que exercem uma influência, quase linear, na velocidade de cálculo.

Apesar de todas as dificuldades apontadas, os códigos *CFD* têm permitido aplicações num vasto número de equipamentos e processos, tais como, tanques agitados, reactores catalíticos, colunas de enchimento, queimadores de baixos teores de  $\text{NO}_x$ , equipamento de mistura e separação, fornalhas ciclónicas, bombas e turbinas, para enunciar algumas aplicações vulgares em *CFD* (Bakker *et al.*, 1994; Jung, 1995). Os processos de combustão beneficiaram, igualmente, da utilização de *CFD*, visto que esta técnica é, inclusivamente, utilizada pela ABB Combustion Engineering Inc. na optimização da geometria das suas fornalhas, assim como na introdução de modificações em fornalhas existentes, através da simulação dos escoamentos. Para aplicações específicas tem surgido, ultimamente, pacotes de subrotinas *CFD* especializadas, como é o caso das aplicações

com carvão pulverizado e gaseificação do carvão provenientes do “*Advanced Combustion Engineering Research Center*”. A construção de códigos especializados será, talvez, a via de tornar a *CFD* mais difundida e acessível.

### ***1.3 Modelação da fornalha***

Embora exista bastante informação sobre fornalhas, normalmente, esta é experimental e com utilização de combustíveis sólidos ou líquidos. Para o caso da modelação de gás natural numa fornalha, existe pouca informação quando comparado com a quantidade de informação experimental, principalmente no que respeita ao tipo de geometrias utilizadas. A possível explicação para tal poderá ser a dimensão das fornalhas, o que torna o cálculo bastante mais pesado. No entanto, com determinados computadores já é possível prever os efeitos dos parâmetros de combustão de uma fornalha, recorrendo a modelos matemáticos, em vez de utilizar relações empíricas baseadas em resultados experimentais, tendo em conta que o estabelecimento de equações diferenciais que governam a mecânica dos fluidos permite a previsão destes escoamentos através da utilização destas equações para a resolução dos problemas, portanto considera-se inovadora a tentativa de modelação de um volume tão avultado, o que leva a que uma reticulação da malha adequada ao problema em causa, se tenha de trabalhar com malhas de mais de 50 000 células, embora o ideal para este caso seja uma malha de cerca de 100 000 células. Tendo em conta que cada milhar de células necessita de cerca de 1 Mb de memória RAM (*Random Access Memory*), significa que são necessárias máquinas que tenham, no mínimo, 128 Mb de memória, só para processamento, embora se considere como satisfatória uma máquina com 256 Mb.

### ***1.4 Meios disponíveis***

Todos os recursos utilizados na realização do presente trabalho foram disponibilizados pelo Instituto Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial (*INETI*), através do seu Departamento de Tecnologias da Combustão (*DTC*).

Este trabalho foi dividido em duas fases que abrangem equipamentos bastante distintos. Uma parte experimental, em que foi possível utilizar todo o tipo de equipamentos comuns neste tipo de instalações, desde o combustível estudado, até ao processamento dos resultados, passando por estudar, montar e utilizar o sistema de alimentação, um queimador protótipo, uma fornalha

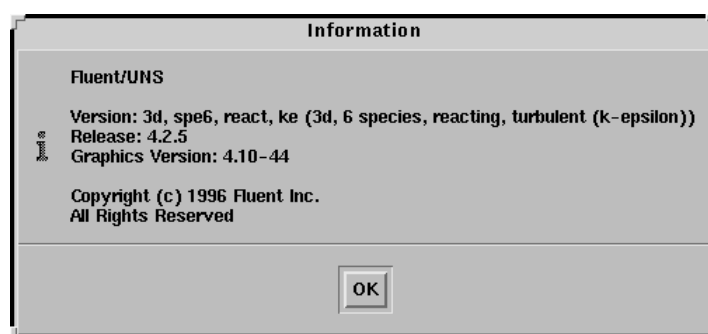
horizontal, o sistema de arrefecimento, os analisadores e o sistema de aquisição de dados. E uma parte numérica com dois tipos de recursos, os reais e os virtuais, ou seja, o *hardware* e o *software*.

No que respeita ao *hardware* foram utilizadas duas estações de trabalho, para modelação e cálculo do problema, e um computador pessoal, para tratamento dos resultados, com as seguintes características:

*Quadro 1.1:* Características das máquinas utilizadas para a realização deste trabalho.

Marca	Sun	Sun	IBM compatível
Modelo	SPARCstation 20	Ultra 10	Pentium
	Modelo 51	Modelo 300	
Memória RAM	128 Mb	256 Mb	32 Mb
Processador	SuperSPARC	UltraSparc Ili	133 MHz
	2 * 50 MHz	300 MHz	
Disco Rígido	FastSCSI – 2	EIDE	1,2 Gb
	2 * 1,05 Gb	4,2 Gb	
Sistema Operativo	SunOS 5.5.1	SunOS 5.6	Windows 95
Interface Gráfico	OpenWindows	OpenWindows	4.00.950a
	Version 3.5.1	Version 3.6.1	

Como código base foi utilizado o pacote de rotinas *UNS* 4.2.5 para dinâmica de fluidos computacional (*CFD*), desenvolvido pela empresa Fluent Inc., que contém os programas *tfilter2.4*, *cortex3.2*, *prepdf2.1*, *tgrid3.0*, *ralf4.2* e *uns4.2*.



*Figura 1.2:* Informações sobre o principal *software* utilizado.

### ***1.5. Organização da dissertação***

O presente trabalho divide-se em oito capítulos, onde se inclui o método numérico utilizado, a caracterização dos fluidos, a instalação experimental, os ensaios experimentais, os parâmetros de modelação, os ensaios numéricos, a análise dos resultados e as conclusões.

No *Capítulo II* é descrito, de forma genérica, o método numérico utilizado nas simulações. São apresentadas as formas básicas das equações de conservação, os três modelos de turbulência ( $k$ - $\epsilon$ , *RNG* e *RSM*) utilizados, bem como os três modelos de radiação (*DTRM*, P-1 e Rosseland). A modelação da combustão é feita segundo três possibilidades distintas de reacções, por forma a permitir uma variação do esforço computacional com as consequentes variações dos resultados. O processo de cálculo iterativo é descrito de forma simplificada, incluindo a definição dos critérios de paragem que garantem a convergência das simulações.

No *Capítulo III* são descritos os ensaios cromatográficos efectuados ao combustível, apresentados os valores obtidos, assim como o resultado das recolhas bibliográficas, relativas à variação de diversas propriedades com a temperatura, das espécies químicas presentes na combustão. Determina-se os parâmetros polinomiais que definem as mencionadas propriedades em termos de modelação.

No *Capítulo IV* são descritos os principais equipamentos utilizados na obtenção dos resultados experimentais, a usar na validação do modelo numérico. Entre os equipamentos mencionados encontram-se os rotâmetros e mano-redutores, para a alimentação do combustível, o queimador, a própria fornalha, os analisadores, a aquisição e o tratamento de dados.

No *Capítulo V* são descritos os ensaios experimentais de validação, através das condições impostas ao funcionamento da fornalha, bem como se apresentam os resultados desses mesmos ensaios, na forma de temperatura e composição dos gases, para os diversos ensaios realizados.

No *Capítulo VI* é definida a malha a utilizar de entre três possibilidades: 31 067; 78 003; e 120 000 células. É escolhido o modelo de turbulência, entre os modelos  $k$ - $\epsilon$ , *RNG* e *RSM*, utilizando para tal um escoamento isotérmico. Visto este estudo recair num sistema com combustão, define-se o modelo de radiação a utilizar por comparação entre um modelo discreto de radiação, o Modelo *DTRM*, com o caso mais simples do modelo P-N, o Modelo P-1, e com um modelo de

aproximação estatística, o Modelo de Rosseland. Define-se o número de direcções discretas de radiação a considerar na aplicação do Modelo *DTRM*. São comparados casos com 4, 9, 16, 25 e 36 raios. Discute-se, ainda, os modelos de combustão, propriamente ditos, de entre os modelos utilizados: o *Modelo 1 - Mecanismo de passo único*, o *Modelo 2 - Mecanismo de duplo passo*, e o *Modelo 3 - Mecanismo de duplo passo multi-percursor*.

No *Capítulo VII* são apresentados os resultados dos ensaios numéricos e analisados juntamente com os resultados dos ensaios experimentais. É discutida a validade do modelo global utilizado para representar a fornalha considerada.

No *Capítulo VIII* apresentam-se as conclusões resultantes deste trabalho, bem como se propõe o trabalho futuro a realizar nesta área.

No final, apresentam-se as *Referências Bibliográficas* mencionadas ao longo deste trabalho.

---

# Capítulo II

## 2 Método numérico

O *Fluent/UNS* fornece potencialidades de modelação razoáveis para uma gama alargada de problemas de escoamento de fluidos incompressíveis e compressíveis, laminares e turbulentos. No *UNS*, uma larga gama de modelos matemáticos está combinada com a possibilidade de modelar geometrias complexas. Embora as capacidades de modelação sejam razoáveis, os métodos numéricos empregues neste código estão melhor adaptados para casos que envolvam escoamentos incompressíveis ou escoamentos compressíveis, desde que subsónicos.

Modelos de turbulência precisos e robustos são uma componente vital do conjunto de modelos do *UNS*. Os modelos de turbulência fornecidos têm uma grande gama de aplicabilidade sem necessitarem de grandes afinações para uma aplicação específica, e incluem os efeitos de outros fenómenos físicos, tais como as flutuações e a compressibilidade. Foi dada particular atenção a problemas como a precisão junto das paredes, através da utilização, adicional, de funções parietais. É possível modelar diversos modos de transferência de calor, incluindo a convecção natural, forçada ou mista, com ou sem complicações adicionais, tais como meios porosos. O conjunto de modelos de radiação e submodelos relacionados, para modelar meios participantes, são gerais e levam em consideração as dificuldades de um problema de combustão. Uma particularidade deste código é a sua capacidade de modelar fenómenos de combustão através de modelos de dissipação da turbulência ou de modelos de funções de densidade de probabilidade (*PDF – Probability Density Functions*).

### 2.1 Equações de Navier-Stokes

Este código resolve as equações de Navier-Stokes para a conservação de massa e de momento (quantidade de movimento) quando calcula escoamentos laminares sem transferência de calor ou



outros modelos adicionais. Para escoamentos que envolvam transferência de calor, é necessário resolver uma equação adicional para a conservação de energia (*Equação 2.26*). Para escoamentos que envolvam mistura de espécies químicas ou reacções, torna-se necessário resolver uma equação de conservação das espécies (*Equação 2.45*) ou, se for utilizado o modelo *PDF*, são utilizadas equações de conservação para a fracção de mistura e para a sua variação. São, também, resolvidas equações de conservação adicionais para  $k$  e para  $\varepsilon$  se o escoamento for turbulento (*Equação 2.9* e *Equação 2.10* ou *Equação 2.16* e *Equação 2.17*).

Nesta secção são apresentadas as equações para escoamentos laminares, visto que as equações de conservação relevantes para a transferência de calor, turbulência, e transporte de espécies serão apresentadas nas secções seguintes.

### 2.1.1 Equação de conservação da massa

A equação para a conservação de massa, ou equação da continuidade, pode ser escrita da seguinte forma (Bird *et al.*, 1960; Fletcher, 1988):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (\text{Equação 2.1})$$

A *Equação 2.1* é a forma geral da equação de conservação de massa e é válida quer para escoamentos incompressíveis, quer para escoamentos compressíveis. A fonte  $S_m$ , aqui presente, é a massa adicionada à fase contínua pela segunda fase dispersa (p.e., devido à vaporização de gotículas), quando esta existe.

### 2.1.2 Equação de conservação do momento

A conservação do momento na direcção  $i$  numa grelha de referência inercial (não acelerada) é descrita por Bird *et al.* (1960) como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (\text{Equação 2.2})$$

onde  $p$  é a pressão estática,  $\tau_{ij}$  é o tensor das tensões (“*stress tensor*”) e  $\rho g_i$  e  $F_i$ , aqui presentes, são, respectivamente, a força gravitacional e forças externas (p.e., que surgem da interacção com a

fase dispersa), na direcção  $i$ .  $F_i$  pode, também, conter outros termos fonte dependentes do modelo, como as forças centrífuga e de Coriolis.

O tensor das tensões  $\tau_{ij}$  é dado por Yamamoto *et al.* (1988) como:

$$\tau_{ij} = \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \quad (\text{Equação 2.3})$$

onde  $\mu$  é a viscosidade molecular e o segundo termo no segundo membro da equação é o efeito da dilatação do volume.

## 2.2 Modelação da turbulência

A maioria dos modelos de turbulência convencionais baseia-se nas “*Médias de Reynolds*” das equações de conservação. Na média de Reynolds, todas as variáveis utilizadas nas equações originais de Navier-Stokes são decompostas numa componente média (temporal) e numa componente flutuante. Para as componentes da velocidade:

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (\text{Equação 2.4})$$

onde  $\bar{u}_i$  e  $u_i'$  são, respectivamente, as componentes média e flutuante da velocidade. Da mesma forma se aplica a decomposição para a pressão e os restantes escalares:

$$\phi_i = \bar{\phi}_i + \phi_i' \quad (\text{Equação 2.5})$$

onde  $\phi$  representa qualquer escalar (pressão, entalpia, concentração das espécies, etc.).

Substituindo estas expressões pelas variáveis de escoamento nas equações instantâneas da continuidade e do momento e tomando uma média temporal (suprimindo o traço por cima do valor da velocidade média,  $\bar{u}$ , por facilidade de escrita), chega-se às equações médias do momento que o *UNS* utiliza para resolver escoamentos turbulentos:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (\text{Equação 2.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left( \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -\overline{\rho u_i u_j} \right) \quad (\text{Equação 2.7})$$

As Equações 2.6 e 2.7 são denominadas equações de Navier-Stokes com média de Reynolds (*RANS* – “*Reynolds-Averaged*” *Navier-Stokes*), e têm a mesma forma que as equações instantâneas de Navier-Stokes (Paterson e Apelt, 1988), com as velocidades e as restantes variáveis a representarem, agora, valores médios. Segundo Paterson e Apelt (1988), nas equações *RANS*, os efeitos de turbulência são representados pelas “*Tensões de corte de Reynolds*”,  $\left( -\overline{\rho u_i u_j} \right)$ . Estas tensões necessitam ser modeladas para se poder proceder ao fecho da Equação 2.7.

O *UNS* relaciona as tensões de corte de Reynolds com o escoamento médio através de qualquer um dos três modelos de turbulência:

- Modelo “*k-ε standard*” (*k-ε*);
- Modelo “*ReNormalization Group k-ε*” (*RNG*); e
- Modelo “*Reynolds Stress*” (*RSM*).

Estes três modelos, no *UNS*, foram concebidos para serem modelos de turbulência largamente aplicados na engenharia. Contudo, existem algumas considerações que podem ditar a adequação de um determinado modelo de turbulência ao problema em causa.

### 2.2.1 Modelo *k-ε*

O modelo *k-ε* é um modelo semi-empírico. As equações do modelo são derivadas das equações *RANS* e assume que o escoamento é completamente turbulento e que os efeitos da viscosidade molecular são negligíveis. Portanto, o modelo *k-ε* é válido, apenas, para escoamentos completamente turbulentos (Agouzoul *et al.*, 1988).

Neste modelo as tensões de Reynolds, da Equação 2.7, são modeladas através da “*Hipótese de Boussinesq*” (Yamamoto *et al.*, 1988):

$$-\overline{\rho u_i u_j} = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (\text{Equação 2.8})$$

A viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , é calculada através da energia cinética turbulenta,  $k$ , e da sua taxa de dissipação,  $\varepsilon$ , a partir de (Armfield e Fletcher, 1988; Agouzoul *et al.*, 1988; Jaberg e Algermissen, 1988 e Morel *et al.*, 1992)

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{Equação 2.9})$$

A energia cinética turbulenta,  $k$ , e a sua taxa de dissipação,  $\varepsilon$ , na *Equação 2.9*, são obtidas a partir das soluções das respectivas equações de transporte (Mesynger e Farouk, 1996):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon \quad \text{e} \quad (\text{Equação 2.10})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \{G_k + (1 - C_{3\varepsilon})G_b\} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (\text{Equação 2.11})$$

onde  $G_k$  é a formação de  $k$  devido às tensões de corte turbulentas e é determinado por:

$$G_k = -\overline{\rho u_i u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (\text{Equação 2.12})$$

e  $G_b$  é a formação de  $k$  devido à flutuação:

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (\text{Equação 2.13})$$

onde  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento para temperatura e entalpia, e  $\beta$  é o coeficiente de expansão térmica:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (\text{Equação 2.14})$$

Para gases ideais, a *Equação 2.13* reduz-se a

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \text{Pr}_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (\text{Equação 2.15})$$

As constantes do modelo  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$ ,  $C_\mu$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  têm, por defeito, os seguintes valores (Agouzoul *et al.*, 1988; Yamamoto *et al.*, 1988):

*Quadro 2.1: Constantes do modelo  $k$ - $\varepsilon$*

$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
1,44	1,92	0,09	1,0	1,3

Assim como  $\text{Pr}_t = 0,85$  (“*Fluent User's Manual*”, 1996).

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  tem sido o cavalo de batalha dos modelos de turbulência (Burns *et al.*, 1988) durante mais de duas décadas e tem as desejadas características de robustez, economia e um largo domínio de aplicação (Paterson e Apelt, 1988). Enquanto o modelo  $k$ - $\varepsilon$  é utilizado por estas razões, outro factor importante é que, até recentemente, não havia grandes razões para se mudar para outro modelo de turbulência.

### 2.2.2 Modelo RNG

Ao contrário do modelo  $k$ - $\varepsilon$  que se baseia na média de Reynolds, o modelo *RNG* deriva das equações instantâneas de Navier-Stokes, utilizando uma rigorosa técnica matemática denominada “*Método de Grupos Renormalizados*”. A derivação analítica resulta num modelo com constantes diferentes das do modelo  $k$ - $\varepsilon$ , para além de termos e funções adicionais nas equações de transporte. Por exemplo, a equação de transporte para  $\varepsilon$  inclui um termo de taxa de deformação (“*rate of strain*”) que é importante para o tratamento de efeitos de não-equilíbrio e de escoamentos na camada limite (p.e., escoamentos com separação ou com pontos de estagnação).

Com base nestes fundamentos o modelo *RNG* fornece um processo geral para obter previsões melhoradas de escoamentos na camada limite, com elevada curvatura e com rotação, baixo número de Reynolds ou de transição, bem como transferência de calor e massa nas paredes.

O modelo de turbulência *RNG* difere do modelo *k-ε* e das suas variantes, em vários aspectos importantes: *i*) as constantes e funções utilizadas no modelo *RNG* são determinadas através de desenvolvimentos teóricos e não pelo empirismo; *ii*) os efeitos da existência de baixos valores de números de Reynolds, em certas zonas do domínio de cálculo, estão incluídos na teoria do *RNG*, permitindo a previsão de escoamentos mistos ou quase laminares; *iii*) o aparecimento de novos termos na equação de transporte da dissipação, incluindo o termo de taxa de deformação, é importante para o tratamento dos efeitos de não-equilíbrio e escoamentos com zonas de estagnação; e *iv*) as equações de transporte turbulento foram expandidas de modo a permitir prever escoamentos altamente rotativos (elevado “*swirl*”).

Ao contrário do modelo *k-ε*, o modelo *RNG* permite descrever a existência de pequenos “turbilhões” (“*eddies*”). Este método assume que em escoamentos turbulentos, os turbilhões possuem dimensões de tamanho  $L$  até tamanho  $L/Re^{3/4}$ . Na realidade existem turbilhões de dimensões muito mais pequenas, mas por possuírem uma energia baixa, devido à dissipação viscosa, não são contabilizados por este modelo.

O modelo *RNG* derivado da técnica estatística acima descrita tem a mesma forma que o modelo *k-ε*, como tal as equações do momento que derivam da teoria *RNG* são as seguintes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_{eff} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (\text{Equação 2.16})$$

A teoria *RNG* também fornece as equações de transporte para  $k$  e para  $\varepsilon$  como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \mu_i S^2 - \rho \varepsilon \quad (\text{Equação 2.17})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \mu_i S^2 - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R \quad (\text{Equação 2.18})$$

onde  $\alpha_k$  e  $\alpha_\varepsilon$  são, respectivamente, o inverso dos números de Prandtl efectivos para  $k$  e para  $\varepsilon$  e o termo  $R$  é a taxa de deformação, definida por

$$R = \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta / \eta_0)}{1 + \beta \eta^3} \cdot \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (\text{Equação 2.19})$$

O modelo *RNG* parece bastante similar ao modelo  $k$ - $\varepsilon$ , excepto nos valores das constantes do modelo. A principal diferença reside na equação do  $\varepsilon$ . Note-se que o modelo *RNG* tem um novo termo fonte na sua equação do  $\varepsilon$ , que não existe no modelo  $k$ - $\varepsilon$ . Pode-se, também, verificar que as constantes do modelo *RNG*,  $C_{1\varepsilon} = 1,42$  e  $C_{2\varepsilon} = 1,68$ , assumem valores diferentes das constantes do modelo  $k$ - $\varepsilon$ ,  $C_{1\varepsilon} = 1,44$  e  $C_{2\varepsilon} = 1,92$ . Em particular o valor de  $C_{2\varepsilon}$  que é substancialmente mais baixo no modelo *RNG*.

O modelo *RNG*, tal como implementado no código utilizado, tem muitas das características de um bom modelo de turbulência para engenharia. Nessas características podem-se incluir a versatilidade, a economia e a robustez. O domínio de aplicação é consideravelmente mais alargado que o do modelo  $k$ - $\varepsilon$  e os recursos computacionais necessários apenas são aumentados de forma marginal. Este modelo não necessita de alteração nos valores das constantes do modelo e os resultados melhorados dele provenientes foram documentados para uma larga gama de escoamentos turbulentos, incluindo escoamentos em separado, escoamentos dependentes do tempo, escoamentos com forças e curvaturas, efeitos devido a baixos valores de número de Reynolds, escoamentos com transferência de calor e massa e escoamentos rotacionais.

### 2.2.3 Modelo *RSM*

A maior limitação do modelo  $k$ - $\varepsilon$  é, como se referiu, a que resulta do isotropismo de  $\mu_t$ . Isto implica que para uma dada posição, as escalas de velocidade e comprimento são as mesmas em todas as direcções. Em escoamentos complexos, como é o caso dos escoamentos rotativos, as escalas de comprimento e velocidade variam significativamente com a direcção. Para tais escoamentos, o modelo  $k$ - $\varepsilon$  é, portanto, inadequado e produz, potencialmente, resultados fisicamente incorrectos (Armfield e Fletcher, 1988). O modelo *RSM*, por considerar o cálculo das tensões de Reynolds individuais, que aparecem na Equação 2.2, é uma boa alternativa nestes

casos. Este modelo envolve cálculos individuais das tensões de Reynolds, através da equação diferencial de transporte (Peeters e Henkes, 1992),

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{u'_i u'_j}) + \mu_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) = & - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \overline{u'_i u'_j u'_k} \right) + \frac{p'}{\rho} (\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j) - v \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right] - \\ & - \left[ \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right] + \frac{p'}{\rho} \left[ \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right] - 2v \left[ \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right] - \\ & - 2\Omega_k \left[ \overline{u'_j u'_m} \varepsilon_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} \varepsilon_{jkm} \right] + S_{ij} + D_{ij} \end{aligned} \quad (\text{Equação 2.20})$$

onde  $S_{ij}$  e  $D_{ij}$  são termos relacionados com a curvatura do escoamento que se incluem quando são utilizadas velocidades cilíndricas. Os valores para  $S_{ij}$  e  $D_{ij}$  encontram-se no *Quadro 2.2*.

*Quadro 2.2:* Termos relacionados com a curvatura do escoamento

no modelo *RSM* onde  $B \equiv \left( \frac{1}{r^2} \partial_\theta \mu_t \right) + \frac{2\mu_t}{r^2} \partial_\theta$ .

$ij$	$S_{ij}$	$D_{ij}$	
		<i>algébrico</i>	<i>diferencial</i>
$xx$	-	-	-
$xr$	$\rho \frac{v_\theta}{r} \overline{v'_x v'_\theta}$	$-\overline{v'_x v'_r} \frac{\mu_t}{r^2}$	$-B \overline{v'_x v'_\theta}$
$x\theta$	$\rho \frac{v_\theta}{r} \overline{v'_x v'_r}$	$-\overline{v'_x v'_\theta} \frac{\mu_t}{r^2}$	$B \overline{v'_x v'_r}$
$rr$	$2\rho \frac{v_\theta}{r} \overline{v'_r v'_\theta}$	$-2 \left( \overline{v_r'^2} - \overline{v_\theta'^2} \right) \frac{\mu_t}{r^2}$	$-2B \overline{v'_r v'_\theta}$
$r\theta$	$\rho \frac{v_\theta}{r} \left( \overline{v_\theta'^2} - \overline{v_r'^2} \right)$	$-4 \overline{v'_r v'_\theta} \frac{\mu_t}{r^2}$	$B \left( \overline{v_r'^2} - \overline{v_\theta'^2} \right)$
$\theta\theta$	$-2\rho \frac{v_\theta}{r} \overline{v'_r v'_\theta}$	$2 \left( \overline{v_r'^2} - \overline{v_\theta'^2} \right) \frac{\mu_t}{r^2}$	$2B \overline{v'_r v'_\theta}$

O *UNS* aproxima vários termos da *Equação 2.20* para tornar o balanço possível. Primeiro, é modelado o termo de transporte difusivo através de um coeficiente escalar de difusão:



$$-\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \overline{(u'_i u'_j u'_k)} + \frac{\overline{p'}}{\rho} (\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j) - \nu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right] = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial (\overline{u'_i u'_j})}{\partial x_k} \right) \quad (\text{Equação 2.21})$$

Esta aproximação é uma forma simplificada da hipótese generalizada de um gradiente difusivo:

$$-\frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \overline{(u'_i u'_j u'_k)} + \frac{\overline{p'}}{\rho} (\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j) - \nu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right] = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( C_s \frac{\overline{u'_k u'_l}}{\varepsilon} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_l} \right) \quad (\text{Equação 2.22})$$

onde  $C_s = 0,22$  (Chen e Pereira, 1996) e  $k = \frac{1}{2} \sum_i \overline{u'^2_i}$

O termo de pressão na *Equação 2.20* é aproximado como

$$\frac{\overline{p'}}{\rho} \left[ \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right] = -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \left[ \overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right] - C_2 \left[ P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} P - S_{ij} \right] + \Phi_{ij}^{\sigma} \quad (\text{Equação 2.23})$$

onde  $C_1$  e  $C_2$  são constantes empíricas com os valores, respectivos, de 1,8 e 0,6 (Chen e Pereira, 1996) e  $P = \frac{1}{2} \overline{P_{ii}}$ ,  $P_{ij} = \overline{p' u'_i u'_j}$ , como definido na *Equação 2.20*, é (Chen e Pereira, 1996 e Peeters e Henkes, 1992)

$$P_{ij} = -\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} - \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \quad (\text{Equação 2.24})$$

Note-se que na *Equação 2.20*, o termo de dissipação é assumido como isotrópico e é aproximado pelo escalar da taxa de dissipação

$$2\nu = \frac{\overline{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}} = \frac{2}{3} \delta_{ij} \varepsilon \quad (\text{Equação 2.25})$$

A taxa de dissipação,  $\varepsilon$ , é calculada pela equação de transporte (*Equação 2.11*).

O grande inconveniente da utilização deste modelo prende-se com o excessivo esforço computacional que envolve a determinação das tensões de Reynolds individuais (seis equações de transporte para as tensões de Reynolds e uma para  $\varepsilon$ ). Por outro lado o algoritmo utilizado no cálculo não é suficientemente robusto, o que conduz a frequentes divergências numéricas em escoamentos rotativos.

O modelo *RSM* utiliza sete equações para a solução da turbulência. Este valor pode ser comparado com as duas equações utilizadas nos modelos *k-ε* e *RNG*. Este modelo de sete equações não assume, tal como os modelos de duas equações, que a turbulência é isotrópica (ou quase, no caso do modelo *RNG*), mas em contrapartida implica consequentes custos ao nível do esforço computacional.

### 2.3 Modelação da radiação

O *UNS* resolve a equação da energia na forma de uma equação de transporte para a temperatura estática,  $T$ , ou entalpia,  $h$ . A forma entálpica da equação da energia apenas é resolvida quando se utiliza o modelo *PDF* de combustão não-adiabática. Em todos os restantes casos é utilizada a equação da energia na forma da temperatura.

A equação da energia pode ser escrita em função da entalpia sensível,  $h$ , como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i}(k + k_t) \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j'} h_{j'} J_{j'} + \frac{Dp}{Dt} + (\tau_{ik})_{eff} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + S_h \quad (\text{Equação 2.26})$$

onde  $k$  é a condutividade molecular,  $k_t$  é a condutividade devido ao transporte turbulento ( $k_t = \mu_t / Pr_t$ ),  $J_{j'}$  é o fluxo de difusão da espécie  $j'$ , e o termo fonte  $S_h$  inclui calor proveniente de reacções químicas e as trocas de calor entre fases.

A entalpia sensível,  $h$ , é definida como

$$h = \sum_{j'} m_{j'} h_{j'} \quad (\text{Equação 2.27})$$

onde  $m_{j'}$  é a fracção mássica da espécie  $j'$  e (Whitaker, 1977)

$$h_{j'} = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j'} dT \quad (\text{Equação 2.28})$$

onde  $T_{ref}$  é 298,15 K.

A Equação 2.26 inclui o efeito proveniente da difusão das espécies no transporte da entalpia,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j'} h_{j'} J_{j'} \quad (\text{Equação 2.29})$$

que contribui para o balanço de energia, particularmente no caso do número de Lewis se encontrar bastante afastado da unidade.

O termo fonte  $S_h$ , na Equação 2.26, inclui a fonte de energia proveniente de reacções químicas:

$$S_{h\ reaction} = \sum_{j'} \left[ \frac{h_{j'}^o}{M_{j'}} + \int_{T_{ref,j'}}^{T_{ref}} C_{p,j'} dT \right] R_{j'} \quad (\text{Equação 2.30})$$

onde  $h_{j'}^o$  é a entalpia de formação da espécie  $j'$  e  $R_{j'}$  é a taxa volumétrica de formação da espécie  $j'$ .

Relativamente à modelação da radiação, propriamente dita, o *UNS* fornece três modelos de radiação que tornam possível a inclusão de radiação, com ou sem meios participantes, nas simulações de transferência de calor:

- Modelo de radiação de transferência discreta (*DTRM* – “*Discrete Transfer Radiation Model*”);
- Modelo de radiação P-1
- Modelo de radiação de Rosseland

O aquecimento ou arrefecimento de superfícies, na fase contínua, devido à radiação e/ou fontes ou poços de calor podem ser incluídos na modelação utilizando um destes modelos de radiação.

A equação de transferência de radiação (RTE – “Radiative Transfer Equation”) para um meio com dispersão (“scattering media”), emissor e absorvente é (Liu *et al.*, 1992)

$$\frac{dI(s, \omega)}{ds} + (a + \sigma_s)I(s, \omega) = a \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(s, \omega) \Phi d\omega \quad (\text{Equação 2.31})$$

onde  $a$  é o coeficiente de absorção,  $\sigma_s$  é o coeficiente de dispersão,  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann, cujo valor é  $5,672 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$ ,  $I$  é a intensidade radiativa, que depende da posição  $s$  e do ângulo sólido  $\omega$ ,  $T$  é a temperatura local e  $\Phi$  é a função de fase. Considera-se  $(a+\sigma_s)s$  como a espessura óptica do meio. A Figura 2.1 ilustra o processo de transferência de calor por radiação.

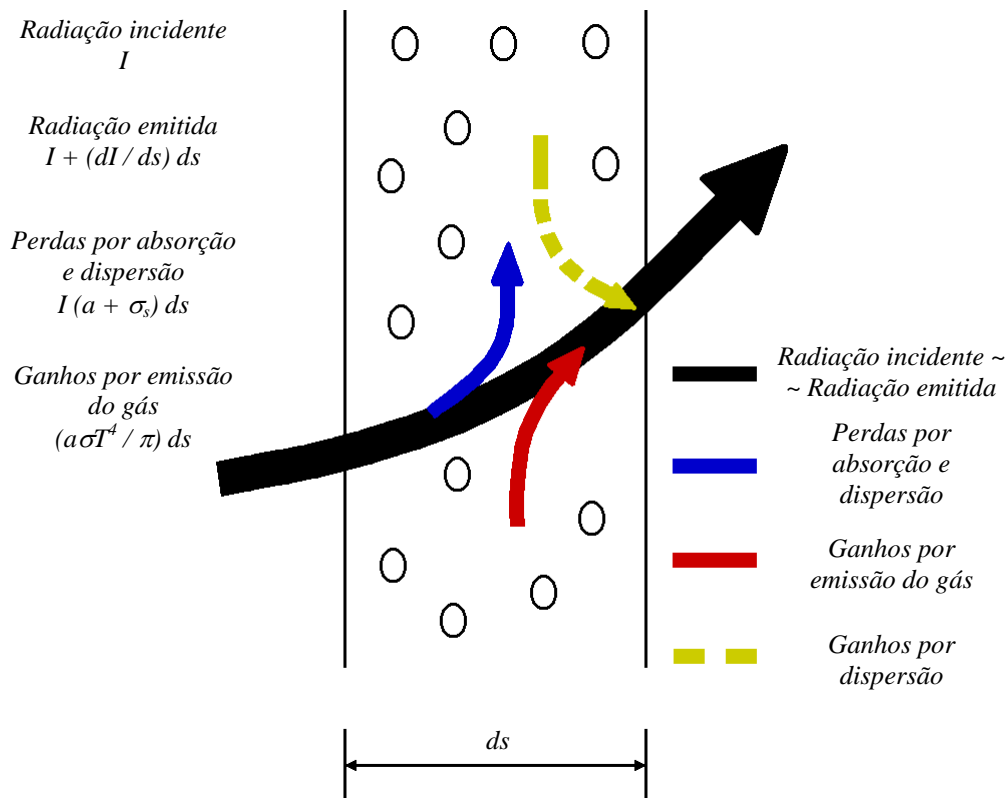


Figura 2.1: Transferência de calor por radiação

Algumas das aplicações típicas vocacionadas para a utilização de transferência de calor por radiação em modelação:

- Transferência de calor por radiação de chamas;

- Aquecimento ou arrefecimento radiante de superfície para superfície; e
- Transferência de calor combinada com radiação e convecção e/ou condução.

Deve-se incluir a transferência de calor por radiação nas simulações quando o fluxo de calor radiante,  $Q_{rad} = \sigma(T_{max}^4 - T_{min}^4)$ , é elevado, quando comparado com a taxa de transferência de calor devida à convecção ou à condução. Normalmente isto acontece a altas temperaturas onde a dependência de quarto grau da temperatura significa que o fenómeno de transferência de calor dominante é a radiação.

Para certos problemas, um determinado modelo de radiação poderá ser mais apropriado que os restantes. Quando se decide qual o modelo a usar, torna-se necessário considerar os seguintes pontos:

- Precisão: o modelo *DTRM* é, normalmente, o mais preciso, o P-1 encontra-se logo atrás e o modelo de Rosseland no fim, visto tratar-se de uma aproximação. Para geometrias complicadas e percursos ópticos pequenos, o modelo *DTRM*, normalmente, consegue melhores resultados, em função de um número de raios suficientemente grande, que os restantes modelos;
- Percurso óptico: o modelo *DTRM* encontra-se melhor adaptado para meios ópticos finos ( $ds \ll 1$ ), enquanto o modelo P-1 e o modelo de Rosseland trabalham melhor com percursos ópticos mais espessos ( $ds > 1$  para o P-1 e  $ds > 3$  para Rosseland). Visto que a convergência do modelo P-1 se deteriora com percursos ópticos superiores a 5, considera-se mais adequado utilizar o modelo de Rosseland nesses casos;
- Esforço computacional: em geral, o modelo P-1 conseguirá chegar a resultados razoavelmente precisos com menos esforço que o modelo *DTRM* para obter resultados idênticos. O modelo de Rosseland ainda requer menos esforço que o modelo P-1, visto que este modelo necessita de resolver mais uma equação de transporte para a radiação incidente, enquanto que o modelo de Rosseland apenas necessita da resolução da equação da energia com uma condutividade radiativa não-linear;

- Dispersão e emissividade: Os modelos P-1 e de Rosseland contabilizam quer a absorção quer a dispersão do meio, enquanto que o modelo *DTRM* assume que a dispersão do meio é negligentemente pequena; e
- Fontes de calor localizadas: nos casos em que estas existem o modelo P-1 poderá exagerar a previsão dos fluxos radiantes. Para este tipo de problemas, considera-se mais apropriada a utilização do modelo *DTRM* com um alargado número de raios.

### 2.3.1 Modelo *DTRM*

O princípio básico deste modelo é que a radiação emitida por um elemento de superfície, numa determinada gama de ângulos sólidos, com  $\theta$  a variar entre 0 e  $\pi/2$  e  $\phi$  a variar entre 0 e  $2\pi$ , pode ser aproximada por um único raio.

As principais vantagens são a sua simplicidade, a possibilidade de aumentar a precisão aumentando o número de raios e a aplicabilidade a uma grande gama de percursos ópticos. Em contrapartida assume que todas as superfícies são difusas, o que significa que a reflexão da radiação incidente é isotrópica relativamente ao ângulo sólido, não inclui o efeito de dispersão e torna-se muito “pesado” para o processador, quando se tenta resolver um problema com um grande número de raios.

A equação para a troca da intensidade radiantes,  $dI$ , ao longo de uma distância,  $ds$ , pode ser escrita como (Cumber, 1995 e Lockwood e Shah, 1981)

$$\frac{dI}{ds} + aI = \frac{a\sigma T^4}{\pi} \quad (\text{Equação 2.32})$$

onde  $a$  é o coeficiente de absorção do gás, tal como estudado no *Capítulo VII*,  $I$  é a intensidade hemisférica total,  $T$  é a temperatura local do gás e  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann.

O modelo *DTRM* integra a *Equação 2.32* ao longo de uma série de raios emitidos a partir das superfícies da zona de fronteira em cada volume discreto de controle. Se  $a$  for constante ao longo de todo o raio, pode-se estimar  $I(s)$  como

$$I(s) = \frac{\sigma T^4}{\pi} (1 - \exp[-as]) + I_0 \exp[-as] \quad (\text{Equação 2.33})$$

onde  $I_0$  é a intensidade radiante no início do raio, que é determinado pelas condições de fronteira. A fonte de energia no fluido devido à radiação é, então, calculada através da soma da variação ao longo de cada raio que atravessa o volume de controle.

### 2.3.2 Modelo P-1

O modelo de radiação P-1 é o caso mais simples do modelo geral P-N, que se baseia na expansão da intensidade radiante,  $I$ , em séries ortogonais de harmônicos esféricos.

Este modelo tem várias vantagens relativamente ao modelo *DTRM*. Para o modelo P-1, a *RTE* (Equação 2.31) é uma equação de difusão, que é simples de resolver com poucos recursos computacionais e este modelo já inclui o efeito de dispersão. Para aplicações em combustão, onde o percurso óptico é grande, este modelo trabalha relativamente bem. Além disso, o modelo P-1 pode ser facilmente aplicado a geometrias complicadas com coordenadas curvilíneas. Como limitações deste modelo, deve-se ter em atenção que assume todas as superfícies como difusas, o que significa que a reflexão da radiação incidente em cada superfície é isotrópica no que respeita ao ângulo sólido, que pode haver uma certa perda de precisão, dependendo da complexidade da geometria, do percurso óptico e, ainda, que este modelo tende a aumentar os fluxos radiantes provenientes de fontes / poços de calor.

Como mencionado acima, o modelo P-1 é o caso mais simples do modelo P-N. Se apenas forem utilizados quatro termos nas séries obtém-se a seguinte equação para o fluxo de radiação  $q_r$ :

$$q_r = -\frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G \quad (\text{Equação 2.34})$$

onde  $a$  é o coeficiente de absorção,  $\sigma_s$  é o coeficiente de dispersão,  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann,  $G$  é a radiação incidente e  $C$  é o coeficiente de função de fase linear-anisotrópica.

Após a introdução do parâmetro

$$\Gamma = \frac{1}{(3(a + \sigma_s) - C\sigma_s)} \quad (\text{Equação 2.35})$$

a Equação 2.34 simplifica-se da seguinte forma:

$$q_r = -\Gamma \nabla G \quad (\text{Equação 2.36})$$

A equação de transporte para  $G$  é

$$\nabla(\Gamma \nabla G) - aG + 4a\sigma T^4 = 0 \quad (\text{Equação 2.37})$$

e o *UNS* resolve esta equação para determinar a intensidade de radiação local quando o modelo P-1 está activo.

Combinando as Equações 2.36 e 2.37 obtém-se

$$-\nabla q_r = aG - 4a\sigma T^4 \quad (\text{Equação 2.38})$$

A expressão  $-\nabla q_r$  pode ser directamente substituída na equação da energia para contabilizar fontes (ou poços) de calor devido à radiação.

Incluído no modelo de radiação P-1 está a possibilidade de modelar a dispersão anisotrópica, o que é feito através de uma função de fase de dispersão linear-anisotrópica (Park *et al.*, 1993):

$$\Phi(\hat{\omega}' \cdot \hat{\omega}) = 1 + C \hat{\omega}' \cdot \hat{\omega} \quad (\text{Equação 2.39})$$

onde  $\hat{\omega}$  é o vector unitário na direcção da dispersão, e  $\hat{\omega}'$  é o vector unitário na direcção da radiação incidente.  $C$  é o coeficiente da função de fase linear-anisotrópica, que é uma propriedade do fluido e assume valores que variam entre  $-1$  e  $1$ . Um valor positivo significa que se dispersa mais energia para a frente que para trás e vice-versa. Um valor nulo define uma dispersão isotrópica, ou seja igual nas duas direcções.



### 2.3.3 Modelo de Rosseland

A aproximação difusiva ou de Rosseland para a radiação é válida quando o percurso óptico  $(a+\sigma_s)L$  (Shafey *et al.*, 1993) é muito maior que 1 e a sua utilização é recomendada onde o percurso óptico é maior que 3 (Soloukhin, 1984).

Este modelo, que pode ser derivado das equações do modelo P-1, tem duas vantagens sobre este, já que não necessita de resolver nenhuma equação de transporte adicional para a radiação incidente, é mais rápido e requer menos memória. Como limitação encontra-se o percurso óptico, que para a utilização deste método, deverá ser superior a 3.

Tal como no modelo P-1, o vector do fluxo de calor radiante num meio cinzento pode ser aproximado pela *Equação 2.36*. O modelo de Rosseland difere do P-1 no que respeita à intensidade de radiação, que é assumida como sendo do corpo negro à temperatura do gás,

$$G = 4\sigma T^4 \quad (\text{Equação 2.40})$$

onde  $G$  é a intensidade radiante que, substituindo na *Equação 2.36*, vem

$$q_r = -4\sigma\Gamma T^3 \nabla T \quad (\text{Equação 2.41})$$

Como o fluxo de calor radiante tem a mesma forma que a lei de condução de Fourier, é possível escrever:

$$q = q_c + q_r \quad (\text{Equação 2.42})$$

$$q = -(k + k_r) \nabla T, \text{ onde} \quad (\text{Equação 2.43})$$

$$k_r = 4\sigma\Gamma T^3 \quad (\text{Equação 2.44})$$

onde  $k$  é a conductividade térmica e  $k_r$  é a conductividade radiante. A *Equação 2.42* é utilizada para calcular o campo de temperaturas.

Este modelo permite, também, o cálculo da dispersão anisotrópica, utilizando a mesma função de fase (*Equação 2.39*) descrita para o modelo P-1 na *Secção 2.3.2* (Modelo P-1)

## 2.4 Modelação da combustão

A equação de conservação das espécies é representada pela *Equação 2.45*:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_{i'}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_{i'}) = \frac{\partial}{\partial x_i}(J_{i'i}) + S_i \quad (\text{Equação 2.45})$$

onde  $m_{i'}$  é a fracção mássica da espécie  $i'$ ,  $J_{i'i}$  é o seu fluxo mássico difusivo na direcção  $i$ , e  $S_{i'}$  é a velocidade global de produção da espécie  $i'$  por unidade de volume devido a uma reacção química ou mudança de fase. O somatório das equações de conservação para todas as espécies presentes na fase contínua corresponde à equação global de conservação de massa, descrita anteriormente (*Equação 2.1*). O fluxo difusivo,  $J_{i'i}$  é determinado como a resultante da difusão devido a efeitos térmicos (Difusão de Soret) e devido a gradientes de concentração. Estes dois efeitos são contabilizados (Zimmermann e Muller, 1992) segundo a *Equação 2.46*:

$$J_{i'i} = -\rho D_{i'm} \frac{\partial m_{i'}}{\partial x_i} - D_{i'}^T \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (\text{Equação 2.46})$$

onde  $D_{i'm}$  é o coeficiente de difusão da espécie  $i'$  na mistura e  $D_{i'}^T$  é o seu coeficiente de difusão térmica.

A resolução das equações de conservação, apresentadas anteriormente, necessita de uma completa descrição de algumas propriedades do fluido (fase contínua), uma vez que, localmente, elas vão variar, não só com a temperatura mas, também, com a composição da mistura gasosa. A densidade local do fluido é estimada assumindo um comportamento de gás ideal, como função da temperatura, pressão e composição, definido pela lei dos gases perfeitos (*Equação 2.47*).

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{i'} m_{i'} / M_{i'}} \quad (\text{Equação 2.47})$$

A viscosidade molecular,  $\mu$ , a condutividade térmica,  $k$ , e o calor específico,  $Cp$ , médios do fluido são estimados localmente, como função da temperatura e composição do gás (Equação 2.48), uma vez que as propriedades de cada componente da mistura são definidas, respectivamente, como uma função polinomial da temperatura (Secções 3.2.2, 3.2.4 e 3.2.5).

$$\mu = \sum_{i'} m_{i'} \mu_{i'} \quad k = \sum_{i'} m_{i'} k_{i'} \quad Cp = \sum_{i'} m_{i'} Cp_{i'} \quad (\text{Equação 2.48})$$

O coeficiente de difusão mássica de cada espécie que compõe a fase contínua,  $D_{i'm}$  (Equação 2.46), é, igualmente, estimado com base numa função polinomial da temperatura (Secção 3.2.3). Para o coeficiente de difusão térmico de uma qualquer espécie  $i'$ ,  $D_{i'}^T$  (coeficiente de difusão de Soret) é determinado com base na seguinte expressão empírica (Kuo, 1986):

$$D_{i'}^T = -2,59 \times 10^{-7} T^{0,659} \left[ \frac{M_{i'}^{0,511} X_{i'}}{\sum_{i'=1}^n M_{i'}^{0,511} X_{i'}} - m_{i'} \right] \times \frac{\sum_{i'=1}^n M_{i'}^{0,511} X_{i'}}{\sum_{i'=1}^n M_{i'}^{0,489} X_{i'}} \quad (\text{Equação 2.49})$$

### 2.4.1 Modelo 1 - Mecanismo de passo único

A simplificação do complexo fenómeno da combustão a um mecanismo de um único passo que envolva a transformação de uma espécie química característica do combustível (metano), num produto característico da combustão (dióxido de carbono), pode ser escrito segundo um esquema reacional de um único passo (Reacção I).



Por ser a aproximação mais simples que pode ser feita, o mecanismo reacional deve traduzir a reactividade média do combustível no interior da fornalha. Tratando-se de uma reacção heterogénea altamente exotérmica, onde existe um oxidante (oxigénio) e uma espécie combustível (metano).

Sendo que todas as espécies são gasosas não se justifica um controle cinético, uma vez que, neste caso, as limitações difusionais à transferência de massa são dominantes sobre as limitações cinéticas.

$$v_I = 1,3 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{2,026 \times 10^8}{RT}\right) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} \cdot [\text{O}_2]^{1,3} \quad (\text{Equação 2.50})$$

Um mecanismo tão simples como o apresentado não pretende caracterizar localmente a combustão no interior da fornalha, mas antes efectuar uma abordagem simplificada ao processo, analisando-o em termos macroscópicos. De facto, a variação da concentração de determinada espécie A em função do tempo, denominada velocidade de reacção, é representada pela *Equação 2.51* (Russel, 1984),

$$-\frac{\partial A}{\partial t} = k[A] \cdot [B] \quad (\text{Equação 2.51})$$

onde se tornou, então, necessário determinar o valor de  $k$ , o que foi feito por Van't Hoff em 1887 e, independentemente, em 1889, por Arrhenius (Russel, 1984), que após estudo exaustivo calculou o valor de  $k$  através da *Equação 2.52*,

$$k = Ae^{-Ea/RT} \quad (\text{Equação 2.52})$$

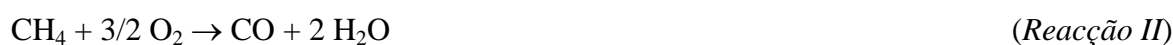
ficando esta expressão a ser conhecida como equação de Arrhenius. Este tipo de aproximações permitem, sobretudo, avaliar e afinar alguns parâmetros do modelo numérico (como o coeficiente externo de transmissão de calor, a intensidade turbulenta, ou os parâmetros de funcionamento do *DTRM*, quando utilizado), assim como verificar o comportamento da fornalha sob diferentes condições de operação, através da utilização de um algoritmo simplificado, o que reduz o esforço computacional associado a cada solução numérica.

Os mecanismos de um único passo tendem a produzir temperaturas adiabáticas de chama muito elevadas, uma vez que todo o calor gerado pelo combustível é libertado numa única etapa reacional. Este facto requer que sejam perfeitamente definidas as propriedades físicas das espécies químicas a considerar no modelo, uma vez que a temperaturas superiores a 2000 K existem quantidades significativas de produtos de dissociação de alguma espécie ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ).

### 2.4.2 Modelo 2 - Mecanismo de duplo passo

Ao se considerar a existência de duas etapas reacionais na modelação da combustão do gás natural, torna-se necessário introduzir uma nova espécie química intermediária, o monóxido de carbono. Relativamente ao *Modelo 1* este sistema caracteriza-se, fundamentalmente, pela transferência de parte do calor libertado na combustão, para zonas mais ou menos afastadas da zona directa de combustão.

Assim a sequência reacional genérica proposta para um mecanismo deste tipo assenta numa cinética em dois passos, segundo um esquema de duas reacções:



O conteúdo de carbono do metano reage numa primeira fase com o oxigénio produzindo CO, que reage, em seguida, com O<sub>2</sub> para dar origem ao CO<sub>2</sub>. O mecanismo formulado desta forma só terá significado ao se garantir que as reacções competidoras que envolvem os reagentes ou os produtos decorrem com cinéticas muito mais lentas. Neste ponto verifica-se um certo consenso de que a *Reacção I* decorre a uma velocidade desprezável quando comparada com a velocidade da *Reacção II*. Através da expressão seguinte verifica-se (Hayhurst, 1991 e Trindade, 1996) a relação entre  $v_{II}$  e  $v_I$ , para qualquer temperatura:

$$v_{II} / v_I = 21,54 \quad (\text{Equação 2.53})$$

Deste modo pode-se admitir que a *Reacção II* produz CO sem permitir que a *Reacção I* produza CO<sub>2</sub>, daí que o mecanismo em dois passos esteja mais adaptado ao caso estudado.

A aplicabilidade dos pressupostos formulados para este modelo dependem de uma adequada definição de um conjunto de parâmetros para a estimativa das velocidades de transferência de calor e massa, assim como a cinética química no seio da fase gasosa. Nenhuma destas velocidades é conhecida com exactidão.

Em termos genéricos, tendo em conta as energias de combustão das *Reacções II e III* vem (Perry e Green, 1984):

*Quadro 2.3: Energias produzidas pelas Reacções II e III.*

<i>Reacção</i>	<i>Energia da reacção J.mol<sup>-1</sup></i>	<i>Energia da combustão %</i>
<i>II</i>	$6,08 \times 10^5$	68,2
<i>III</i>	$2,83 \times 10^5$	31,8

Verifica-se que cerca de 2/3 da energia total da combustão é imediatamente libertada assim que é fornecida à mistura a energia de activação. Este facto implica uma menor dispersão da energia no interior da fornalha. Ambos os passos do mecanismo se consideram controlados cineticamente por uma expressão do tipo de Arrhenius, através da definição de um factor pré-exponencial e de uma energia de activação. A velocidade das reacções é proporcional ao produto das concentrações locais dos reagentes (CO e O<sub>2</sub>), e, para alguns autores (Westbrook e Dryer, 1981; Ha e Yavuzkurt, 1991; Dryer e Glassman, 1972, Ha e Choi, 1994 e Arai e Hasatani, 1987), é, também, função da concentração de H<sub>2</sub>O de acordo com a *Equação 2.54*. Os valores dos parâmetros *A*, *Ea*, *a*, *b* e *c* para esta reacção, dependem do mecanismo considerado. São vários os parâmetros que podem ser encontrados na bibliografia, destacando-se os apresentados no *Quadro 2.4*.

$$v_{III} = A_{III} \exp\left(-\frac{Ea_{III}}{RT}\right) \cdot [CO]^a \cdot [O_2]^b \cdot [H_2O]^c \quad (\text{Equação 2.54})$$

*Quadro 2.4: Parâmetros cinéticos da Reacção III para o cálculo da velocidade reacional determinada segundo a Equação 2.54.*

<i>A<sub>III</sub></i>	<i>Ea<sub>III</sub></i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>Referência</i>
$2,2387 \times 10^{12}$	$1,6747 \times 10^8$	1	0,25	0,5	(Westbrook e Dryer, 1981)
$3,16 \times 10^{12}$	$1,67 \times 10^8$	1,5	0,25	-	(Polifke <i>et al.</i> , 1994)
$1,3 \times 10^{11}$	$1,255 \times 10^8$	1	0,5	0,5	(Ha e Yavuzkurt, 1991)
$1,3 \times 10^{11}$	$5,25 \times 10^8$	1	0,5	0,5	(Arai e Hasatani, 1987)

A *Reacção III* é uma reacção reversível sendo indicado para a energia de activação da reacção inversa um valor idêntico ao da reacção directa, mas o factor pré-exponencial da reacção inversa ( $2,81 \times 10^9 \text{ m}^3 \cdot \text{kgmol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ) é cerca de  $8 \times 10^5$  vezes inferior (Trindade, 1996). A grande diferença nas constantes de velocidade dos dois sentidos da *Reacção III* indica que a reacção inversa só tem algum significado em zonas onde a concentração de  $\text{CO}_2$  é muito elevada e, simultaneamente, as concentrações de  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{O}_2$  muito baixas.

Considerando a presença de água neste mecanismo, foram seleccionados os parâmetros de Westbrook e Dryer (1981), embora não sejam muito diferentes dos restantes, principalmente dos parâmetros de Polifke *et al.* (1994), mesmo que este não considere a existência de água.

### 2.4.3 Modelo 3 - Mecanismo de duplo passo multi-percursor

Este mecanismo considera a existência das principais espécies constituintes do gás natural, metano ( $\text{CH}_4$ ), etano ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ) e propano ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ), a queimarem de acordo com as seguintes reacções:



A expressão para a velocidade reacional das espécies acima mencionadas é do tipo de Arrhenius (*Equação 2.55*) na qual o expoente do combustível,  $a$ , é sempre inferior ao expoente do oxidante,  $b$  (*Quadro 2.5*). Desta forma a contribuição da concentração da espécie combustível, para a velocidade da reacção é superior à contribuição do oxidante, e para o metano esse expoente é negativo, o que indica um aumento de reactividade para baixas concentrações de metano.

$$v = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \cdot [\text{Fuel}]^a \cdot [\text{Oxidante}]^b \quad (\text{Equação 2.55})$$

*Quadro 2.5: Parâmetros cinéticos (Equação 2.55) para as reacções de combustão do modelo de duplo passo multi-percursor (Westbrook e Dryer, 1981), com as unidades em m-sec-kgmol-J-Kelvin.*

<i>Espécie combustível</i>	<i>A unidades consistentes</i>	<i>Ea J.kgmol<sup>-1</sup></i>	<i>a -</i>	<i>b -</i>
CH <sub>4</sub>	$2,8 \times 10^{12}$	$2,026 \times 10^8$	-0,3	1,3
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	$7,31 \times 10^9$	$1,256 \times 10^8$	0,1	1,65
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	$5,62 \times 10^9$	$1,256 \times 10^8$	0,1	1,65

Com base no *Quadro 2.5* é, agora, possível escrever as equações da velocidade das reacções:

$$v_{II} = 2,8 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{2,026 \times 10^8}{RT}\right) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} \cdot [\text{O}_2]^{1,3} \quad (\text{Equação 2.56})$$

$$v_{IV} = 7,31 \times 10^9 \exp\left(-\frac{1,256 \times 10^8}{RT}\right) \cdot [\text{C}_2\text{H}_6]^{0,1} \cdot [\text{O}_2]^{1,65} \quad (\text{Equação 2.57})$$

$$v_V = 5,62 \times 10^9 \exp\left(-\frac{1,256 \times 10^8}{RT}\right) \cdot [\text{C}_3\text{H}_8]^{0,1} \cdot [\text{O}_2]^{1,65} \quad (\text{Equação 2.58})$$

A existência de água no interior da fornalha leva a que esta seja incluída neste modelo, que se pretende aproximar do caso experimental. Daí que tenha sido considerada a sua presença na cinética da *Reacção III*, de acordo com os parâmetros da *Equação 2.59*, provenientes do *Quadro 2.4*.

$$v_{III} = 2,2387 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{1,6747 \times 10^8}{RT}\right) \cdot [\text{CO}] \cdot [\text{O}_2]^{0,25} \cdot [\text{H}_2\text{O}]^{0,5} \quad (\text{Equação 2.59})$$

Relativamente às reacções da água, a mais significativa é a reacção exotérmica que envolve o monóxido de carbono (*Reacção VI*) (Chowdhury, 1994).



$$k_{VI} = 5,14 \times 10^4 \exp(3,995 \times 10^{-4} T) \text{ m}^3 \cdot \text{kgmol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \quad (\text{Equação 2.60})$$

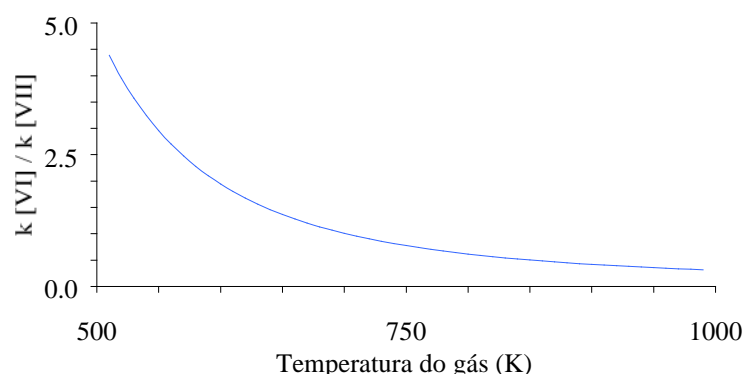


Ao se considerar um mecanismo que englobe a *Reacção VI* é necessário considerar, de igual modo, a sua reacção endotérmica inversa (*Reacção VII*)(Chowdhury, 1994).



$$k_{\text{VII}} = 2,63 \times 10^6 \exp\left(3,995 \times 10^{-4}T - \frac{2762}{T}\right) \text{ m}^3.\text{kgmol}^{-1}.\text{s}^{-1} \quad (\text{Equação 2.61})$$

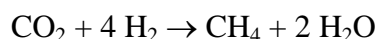
As constantes cinéticas mostram que só tem significado considerar a existência destas duas reacções em sistema, que operem a baixas temperaturas, uma vez que para valores de temperatura superiores a 702 K, o quociente das constantes das velocidades da *Reacção VI* (directa) e da *Reacção VII* (inversa) é unitário (*Figura 2.2*). Como nos sistemas estudados, a temperatura média na zona de existência de CO é sempre superior a 1000 K, a constante de velocidade da *Reacção VI* é cerca de 42 % da constante de velocidade da *Reacção VII*.



*Figura 2.2:* Razão entre as constantes utilizadas para o cálculo da velocidade nas *Reacções VI* e *VII* em função da temperatura.

Por outro lado, ao se incluir no mecanismo a existência de hidrogénio molecular ( $\text{H}_2$ ), é forçoso considerar a importante e complexa cinética reacional deste composto na formação do metano (*Reacções VIII a X*).





(Reacção X)

que reage com o oxigénio para formar monóxido de carbono e água (*Reacção II*).

A grande quantidade de reacções em que o hidrogénio está envolvido implica que a sua inclusão no mecanismo duplicaria o esforço computacional no cálculo da cinética reacional. Uma vez que a importância deste composto só tem algum significado em situações de baixa temperatura ( $< 700 \text{ K}$ ), como mencionado para as *Reacções VI e VII* e como não existe a possibilidade de fazer a aquisição destes valores em termos experimentais, que permitam a comparação de resultados, as *Reacções VIII a X* não foram incluídas no modelo.

## 2.5 Processo de cálculo

O *UNS* resolve as equações diferenciais parciais que governam a conservação de massa, de momento e de escalares como a energia, turbulência e espécies químicas na forma integral. É utilizada uma técnica baseada num volume de controle, que consiste na:

- Divisão do domínio em volumes de controle discretos, através da utilização de uma grelha computacional;
- Integração das equações fundamentais nos volumes de controle individuais para construir as equações algébricas para variáveis discretas (velocidades, pressão, escalares); e
- Solução das equações discretas.

As equações fundamentais de um escoamento são resolvidas sequencialmente. Desde que são conjugadas que são necessárias várias iterações do ciclo de resolução do problema antes de se obter uma solução convergente. Cada iteração consiste nos passos mostrados na *Figura 2.3* e descritos abaixo:

- As equações de momento  $u$ ,  $v$  e  $w$  são resolvidas utilizando os valores actuais de pressão, para permitir a adaptação do campo de velocidade;
- Como as equações obtidas no ponto anterior podem não satisfazer as equações de continuidade a nível local, é derivada uma equação do tipo Poisson para a correcção da pressão, a partir da equação da continuidade e das equações de momento linearizadas.

Esta correcção de pressão é, então, resolvida para obter as correcções necessárias aos campos de pressão e velocidade;

- São resolvidas as equações de  $k$  e  $\varepsilon$  utilizando o campo de velocidade actualizado;
- Quaisquer equações auxiliares (p.e., energia, conservação das espécies e/ou radiação) são resolvidas utilizando os valores já actualizados das outras variáveis;
- São actualizadas as propriedades do fluido; e
- É verificada a convergência.

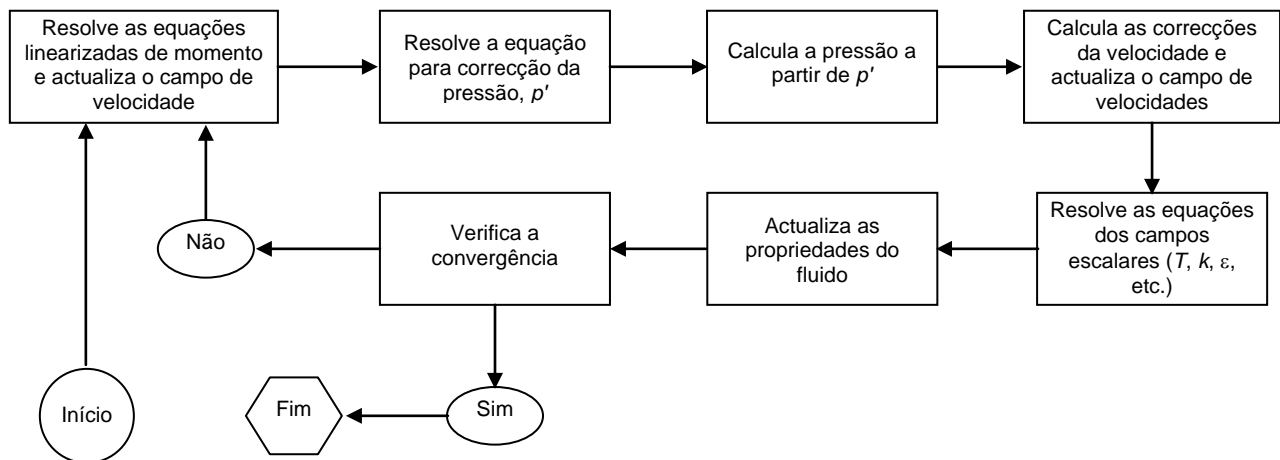


Figura 2.3: Esquema do processo de resolução de um problema.

Estes procedimentos são repetidos até se alcançar um erro de fecho dos balanços que verifiquem um critério de convergência definido (Figura 2.3). A introdução de fenómenos como a radiação, obriga, apenas no caso da utilização do modelo *DTRM*, à alternância no cálculo dos balanços, ou seja, os fluxos de energia radiante são recalculados e actualizados periodicamente após um certo número de iterações para a fase contínua.

Como descrito acima, as equações do momento e da continuidade são resolvidas sequencialmente. Neste processo, a equação da continuidade é utilizada como equação da pressão. Contudo, a pressão não é uma grandeza explícita em escoamentos incompressíveis, visto que a densidade não está directamente relacionada com a pressão.

Utilizando o esquema numérico descrito anteriormente, a equação unidimensional discreta do momento pode ser escrita da seguinte forma:

$$a_p u_p = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + (p_w - p_e)A + S \quad (\text{Equação 2.62})$$

Como o campo de pressão não é conhecido *a priori*, tem de ser obtido como parte da solução.

A equação da continuidade pode ser integrada no volume de controle unidimensional para chegar a

$$J_e - J_w = 0 \quad (\text{Equação 2.63})$$

onde  $J$  é o caudal mássico,  $\rho u A$ . Então

$$(\rho u A)_e - (\rho u A)_w = 0 \quad (\text{Equação 2.64})$$

A família de algoritmos *SIMPLE* (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) é utilizada para introduzir a pressão na equação da continuidade. Esta família de algoritmos utiliza uma relação entre a correcção da pressão e da velocidade para manter a conservação de massa e para obter o campo de pressão. Neste caso, o caudal de qualquer face pode ser escrito como

$$J_e = \hat{J}_e + d_e (p_p - p_w) \quad (\text{Equação 2.65})$$

onde  $\hat{J}_e$  é o termo que contém a influência das velocidades vizinhas  $u_p$  e  $u_e$ , e o termo  $d_e$  pode ser escrito como

$$d_e = \frac{\rho_e A_e^2}{\bar{a}_p} \quad (\text{Equação 2.66})$$

O termo  $\bar{a}_p$  é a média dos valores de  $a_p$  para as células  $P$  e  $E$ .

Se a equação do momento é resolvida estimando o campo de pressão através de  $p^*$ , o caudal resultante  $J_e^*$ , calculado através da *Equação 2.65*,

$$J_e^* = \hat{J}_e^* + d_e (p_p^* - p_w^*) \quad (\text{Equação 2.67})$$

não satisfaz a equação da continuidade. Consequentemente, a correcção  $J_e'$  é adicionada ao caudal  $J_e^*$  para que o caudal corrigido  $J_e$

$$J_e = J_e^* + J_e' \quad (\text{Equação 2.68})$$

satisfaz a equação da continuidade. O algoritmo *SIMPLE* postula que  $J_e'$  pode ser escrito como

$$J_e' = d_e(p_p' - p_w') \quad (\text{Equação 2.69})$$

onde  $p'$  é a correcção da pressão.

O *UNS*, para além do algoritmo *SIMPLE*, que está activo por defeito, também, inclui o algoritmo *SIMPLEC* (*SIMPLE* – Consistent). O procedimento do *SIMPLEC* é idêntico ao do *SIMPLE*, visto que a equação da correcção é idêntica para os dois algoritmos

$$J_e = J_e^* + d_e(p_p' - p_w') \quad (\text{Equação 2.70})$$

Contudo, o coeficiente  $d_e$  é redefinido como

$$d_e = \rho_e A_e^2 / (a_p - \sum_{nb} a_{nb}) \quad (\text{Equação 2.71})$$

A utilização desta modificação na equação de correcção já mostrou que acelera a convergência de problemas onde a conjugação pressão-velocidade é a principal dificuldade na obtenção da convergência.

Foi seleccionada a utilização simultânea de dois critérios de convergência que assentam nos denominados resíduos ou erros de fecho dos balanços das equações. Para cada equação resolvida, em cada iteração, é calculado o seu resíduo normalizado, que é determinado com base no somatório dos erros de todas as células do domínio de cálculo. Para que a solução numérica seja alcançada, o somatório de todos os resíduos normalizados tem de ser inferior a  $1,0 \times 10^{-3}$ , embora

para o caso da entalpia (equação da energia) o somatório do resíduo terá de ser inferior a  $1,0 \times 10^{-6}$ . A utilização simultânea destes dois critérios de paragem dos cálculos é a indicada para a generalidade dos casos numéricos (“*Fluent User's Manual*”, 1996).

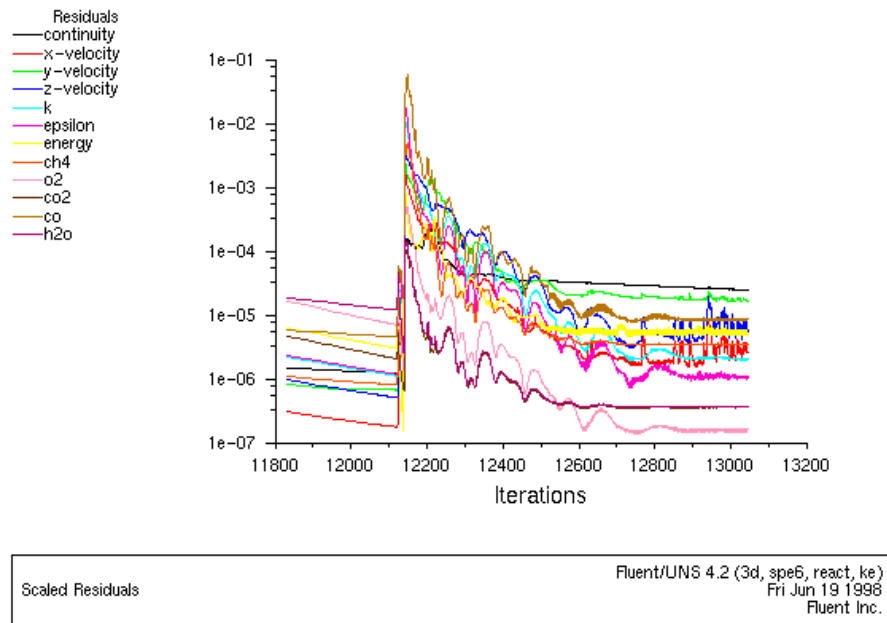


Figura 2.4: Evolução típica dos resíduos normalizados de algumas equações.

## 2.6 Sumário

Neste capítulo é descrito, de forma genérica, o método numérico utilizado nas simulações. São apresentadas as formas básicas das equações de conservação, os três modelos de turbulência ( $k$ - $\epsilon$ ,  $RNG$  e  $RSM$ ) utilizados, bem como os três modelos de radiação ( $DTRM$ ,  $P-1$  e  $Rosseland$ ).

A modelação da combustão é feita segundo três possibilidades distintas de reacções, por forma a permitir uma variação do esforço computacional com as consequentes variações dos resultados.

O processo de cálculo iterativo é descrito de forma simplificada, incluindo a definição dos critérios de paragem que garantem a convergência das simulações.

---

# *Capítulo III*

## ***3 Caracterização das espécies químicas***

Para caracterizar os fluidos utilizados neste trabalho, seja como mistura, seja como componentes individuais dessa mesma mistura, recorreu-se a algumas análises cromatográficas, bem como a diversas referências bibliográficas, como a seguir se descreve.

Este trabalho, no que respeita a espécies químicas, não se torna demasiado complexo visto só existir uma fase (contínua) e todos os seus componentes se encontrarem no estado gasoso, o que torna mais imediato o tratamento de todos os dados relativos às espécies participantes.

### ***3.1 Análise do combustível***

O gás natural, em termos genéricos (Vandaveer, 1965), é uma mistura de gases com hidrocarbonetos, de formação natural, encontrada em formações porosas abaixo da superfície da terra, frequentemente associada ao crude. O principal constituinte, da maioria dos tipos de gás natural, é o metano e os constituintes minoritários são alguns hidrocarbonetos pesados, bem como certos gases inertes de onde se podem destacar o azoto, o dióxido de carbono, o ácido sulfídrico e o hélio. Pode-se verificar, também, a presença de oxigénio e de árgon, embora as respetivas proporções sejam extremamente baixas. O gás natural para comercialização, normalmente tem um teor de metano de 80 a 95 %, percentagens bastante mais baixas de etano e propano e grande parte da restante constituição é azoto. O gás natural tem um poder calorífico

que varia entre 33,5 MJ/m<sup>3</sup>(n) e 44,7 MJ/m<sup>3</sup>(n), bem como uma densidade relativa ao ar de 0,58 a 0,79.

*Quadro 3.1: Composição elementar de diferentes tipos de gás natural e suas proveniências geográficas.*

	He	N <sub>2</sub>	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5+</sub>	H <sub>2</sub> S	CO <sub>2</sub>
<b>Europa</b>									
Lacq França	0	0	68,9	2,9	0,9	0,6	1,0	15,9	9,8
Meillon França	0	0,5	77,4	3,6	1,2	1,0	1,0	6,0	9,3
Groningue Holanda	0,05	14,3	81,2	2,9	0,4	0,15	0,1	0	0,9
Frigg Mar do Norte	0	0,7	94,2	4,6	0,1	0,02	0,08	0	0,3
Heimdal Mar do Norte	0	0,09	86,2	6,4	2,7	1,1	2,5	0	0,2
Odolanov Polónia	0,40	40,73	58,14	0,44	0,02	0	0	0	0,2
<b>Ex-URSS</b>									
Orenbourg	0	4,5	82,4	5,2	1,8	1,0	0,8	2,7	1,5
Astrakhan	0	2,4	49,8	1,6	1,0	0,5	5,8	24,6	14,2
Ourengoi 1	0	1,2	98,0	0,2	0,1	0,1	0	0	0,35
Ourengoi 2	0	0,4	85,0	5,8	5,3	2,4	0,7	0	0,4
<b>Ásia</b>									
Kangan	0	4,9	85,5	4,1	1,4	1,2	1,0	0,05	1,9
Kirkuk Iraque	0	0,03	56,6	17,1	8,7	3,5	1,5	6,8	3,9
Badak Indonésia	0	0,05	87,0	4,6	2,8	1,2	0,65	0	3,7
Hazika Índia	0	0,01	78,1	6,8	4,1	1,7	0,7	0,12	8,5
<b>África</b>									
Hassi R'Mel Argélia	0,19	5,80	83,00	7,10	2,25	1,00	0,45	0	0,21
Líbia	0	0	68,5	15,4	7,6	3,3	1,2	1,5	2,5
Miskar Tunísia	0	18,5	61,0	2,9	0,7	0,4	1,1	0,18	15,2
Kribi Camarões	0	0,7	84,8	7,0	3,8	1,7	1,0	0	1,0
<b>Continente Americano</b>									
Kenai Alasca	0	0,4	97,55	0,05	0	0	0	0	2,0
Ricinus Canadá	0	0,3	56,4	0,6	0,05	0,03	0,12	35,0	7,5
Strachan Canadá	0	0,4	80,3	3,6	1,3	0,9	2,1	9,3	2,1
Venezuela	0	0	75,30	9,04	6,19	2,95	0,96	0	5,56

Fonte: "Aide-mémoire de l'industrie du gaz", (1990)



No *Quadro 3.1* pode-se comparar as diferentes composições dos vários gases naturais provenientes de várias zonas do globo, com especial destaque para o gás natural fornecido por Hassi R'Mel, na Argélia, que é o gás natural que se encontra disponível em Portugal, embora ainda não em todo o país.

No *Quadro 3.2* descreve-se a composição média, e algumas características, que a Transgás disponibiliza para o gás natural que é fornecido para Portugal, que apresenta ligeiras diferenças para a composição apresentada no *Quadro 3.1*.

*Quadro 3.2: Composição e algumas características do Gás Natural de referência.*

<i>Composição</i>	<i>% molar</i>
Metano	83,700
Etano	7,600
Propano	1,920
i-Butano	0,300
n-Butano	0,400
i-Pentano	0,080
n-Pentano	0,090
n-Hexano	0,080
Azoto	5,400
Dióxido de Carbono	0,230
Hélio	0,200
<i>Características</i>	
Peso Molecular, g/mol	18,78
Massa Volúmica, kg/m <sup>3</sup> (n)	0,8404
Poder Calorífico Inferior, MJ/m <sup>3</sup> (n)	37,91

*Fonte: Transgás (divulgação).*

Com base na composição média do gás natural fornecida pela Transgás foi, então, encomendada uma mistura gasosa com, apenas, cinco das espécies químicas, para a realização deste trabalho, visto que não se encontrava disponível, para Lisboa, o fornecimento do gás natural e houve a necessidade de utilizar uma mistura com propriedades semelhantes. A composição da mistura encontra-se descrita no *Quadro 3.3*.

*Quadro 3.3: Composição do gás combustível utilizado.*

<i>Composição</i>	<i>% molar</i>
Metano	83,700
Etano	7,600
Propano	1,920
Azoto	5,400
Dióxido de Carbono	1,380

*Fonte: Ar líquido, 1998.*

Para tentar validar a composição da mistura fornecida pela firma Ar líquido foram feitas três análises cromatográficas que se apresentam nos *Quadros 3.4, 3.5 e 3.6*.

*Quadro 3.4: Resultados do cromatograma nº 1.*

<i>Espécie química</i>	<i>Percentagem no padrão</i>	<i>Área no cromatógrafo</i>	<i>Área na amostra</i>	<i>Percentagem na amostra</i>
CH <sub>4</sub>			5209305,0	62,44
	0,1	9701,5		
	1,5	145319,0		
	10	837795,0		
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	100	-		
			1117941,0	5,74
	0,1	18756,0		
	1,5	291828,0		
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>			436059,0	1,51
	0,1	28527,5		
	1,5	434082,0		
N <sub>2</sub>			23412,0	7,09
	50,0	161504,0		
	70,0	214852,0		
	98,0	-		
CO <sub>2</sub>			1165,0	1,24
	10,0	9398,5		

Quadro 3.5: Resultados do cromatograma nº 2.

<i>Espécie química</i>	<i>Percentagem no padrão</i>	<i>Área no cromatógrafo</i>	<i>Área na amostra</i>	<i>Percentagem na amostra</i>
CH <sub>4</sub>			5580317,0	68,20
	0,1	9525,5		
	1,5	137241,0		
	10	820946,0		
	100	-		
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>			1160963,0	6,33
	0,1	18655,5		
	1,5	275396,0		
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>			447457,0	1,64
	0,1	28035,0		
	1,5	409597,0		
N <sub>2</sub>			21765,0	6,45
	50,0	165653,0		
	70,0	224350,0		
	98,0	-		
CO <sub>2</sub>			1066,0	1,13
	10,0	7567,0		

Quadro 3.6: Resultados do cromatograma nº 3.

<i>Espécie química</i>	<i>Percentagem no padrão</i>	<i>Área no cromatógrafo</i>	<i>Área na amostra</i>	<i>Percentagem na amostra</i>
CH <sub>4</sub>			5841034,0	86,12
	0,1	11605,0		
	1,5	143862,0		
	10	838443,0		
	100	6762652,0		
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>			1174919,0	6,08
	0,1	18504,0		
	1,5	289410,0		
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>			451773,0	1,58
	0,1	27542,0		
	1,5	428778,0		
N <sub>2</sub>			30692,0	9,59
	50,0	158480,0		
	70,0	205597,0		
	98,0	293283,0		

CO <sub>2</sub>	994,0	1,06
10,0	7689,5	

Com base na composição média da Transgás, nos três cromatogramas e na análise da firma “Ar líquido”, fornecida com as garrafas de gás, apresenta-se o *Quadro 3.7*, com a comparação das diversas composições.

*Quadro 3.7: Comparação das diversas composições, quer analisadas quer fornecidas pela Transgás e Ar Líquido.*

Espécie química	Divulgação “Transgás”	Cromatograma			Fornecido “Ar Líquido”
		nº 1	nº 2	nº 3	
CH <sub>4</sub>	83,70	62,44	68,20	86,12	83,699
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	7,60	5,74	6,33	6,08	7,601
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	1,92	1,51	1,64	1,58	1,920
N <sub>2</sub>	5,40	7,09	6,45	9,59	5,400
CO <sub>2</sub>	1,38	1,24	1,13	1,06	1,380

Como os resultados dos cromatogramas são bastantes divergentes, principalmente devido aos padrões disponíveis para a realização dos ensaios, foi assumido, como valor mais fiável, para modelação, a análise realizada, pela Ar líquido à mistura fornecida.

### 3.2 Propriedades das espécies químicas

Para modelar qualquer tipo de combustão é necessário caracterizar convenientemente todas as espécies químicas envolvidas no processo, que, no respeitante à combustão de gás, implica a descrição do combustível, do comburente e gases de combustão. Não apenas os gases finais, mas todas as espécies que se formam e se destroem durante o processo, mas que podem não aparecer num balanço realizado entre a entrada e a saída do sistema.

A estimativa das interações existentes entre as várias espécies químicas envolvidas neste processo depende, em larga medida, da correcta previsão de certas propriedades físicas, como a massa específica, a viscosidade, o calor específico, a difusividade, etc., das espécies químicas que constituem a fase contínua. No âmbito deste trabalho não se justifica a realização de determinações experimentais destas propriedades pelo

que os valores a seguir apresentados derivam de recolhas bibliográficas e da aplicação de técnicas de estimativa de propriedades.

### 3.2.1 Massa específica

A massa específica da mistura em cada ponto do domínio de cálculo é estimada com base na *Equação 2.48*, que pondera, através do somatório no denominador das expressões, a composição nas várias espécies químicas.

### 3.2.2 Viscosidade

A dependência entre a viscosidade molecular de cada espécie e a temperatura foi assumida como seguindo uma variação polinomial. Os valores utilizados para este ajuste polinomial foram obtidos na bibliografia (Rohsenow e Hartnett, 1973; “*Encyclopedie des Gas*”, 1976 e Miller *et al.*, 1976†), considerando-se a gama de temperaturas entre os 273 e os 2000 K. Para as espécies CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> e O<sub>2</sub>, a temperaturas acima de 1250 K, e para as espécies CO e N<sub>2</sub>, a temperaturas acima de 1650 K, foram estimados valores através do *Método de estimativa de Chung et al.*, apresentado por Reid *et al.* (1987).

**Quadro 3.8:** Parâmetros polinomiais para cálculo da viscosidade das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.

<i>Espécie química</i>	$A_0$ $\times 10^6$	$A_1$ $\times 10^8$	$A_2$ $\times 10^{11}$
CH <sub>4</sub>	-9,2708	6,1689	8,9
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-6,7789	2,9498	4,8
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-2,4921	1,2504	3,4
CO <sub>2</sub>	-12,258	5,0844	3,6
CO	-8,6160	6,2866	6,5
H <sub>2</sub> O	-0,33311	-1,1569	18,2
O <sub>2</sub>	-9,3134	6,2085	7,1
N <sub>2</sub>	-19,388	9,0839	4,9

Com base nestes parâmetros, apresenta-se, na *Figura 3.1*, o comportamento da propriedade viscosidade, em função da temperatura.

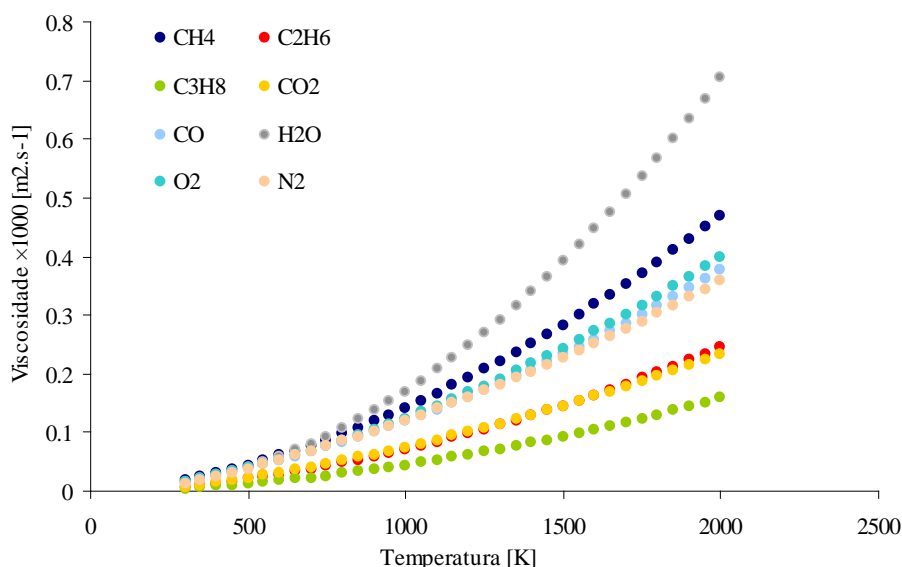


Figura 3.1: Variação da viscosidade em função da temperatura.

### 3.2.3 Difusividade mássica

A difusividade de uma dada espécie  $i'$  numa mistura gasosa é uma função da temperatura, pressão e composição. Os dados existentes para a maior parte das misturas são bastante limitados tanto em exactidão, como em intervalo conhecido, e as correlações propostas por diversos autores para a estimativa de  $D_{i',m}$  têm um campo de aplicação limitado baseando-se mais na teoria do que na experimentação. Considerando misturas gasosas a baixa pressão,  $D_{i',m}$  é inversamente proporcional à pressão, aumenta com a temperatura, e é quase independente da composição. Deste modo, considerando desprezáveis as diferenças de pressão no interior da fornalha, na estimativa de  $D_{i',m}$  considera-se a difusão das diferentes espécies ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_3\text{H}_8$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{O}_2$ ) em azoto como função, exclusiva, da temperatura local. O problema da difusão de cada espécie na mistura de gases de combustão é assim reduzido à situação mais simples de difusão de uma espécie gasosa em azoto, para tal foi utilizada a *Teoria Cinética de Chapman-Enskog* (Reid *et al.*, 1987) que resulta da solução da equação de Boltzmann, através da utilização de alguns métodos de estimativas de propriedades como: o *Método do potencial 12-6 de Lennard-Jones* (Reid *et al.*, 1987); o *Método de Wilke e Lee* (Reid *et al.*, 1987); e o *Método de Fuller et al.* (Reid *et al.*, 1987). Os valores produzidos pela aplicação destas teorias para

temperaturas entre os 273 e os 2000 K foram ajustados a um polinómio do tipo que se mostra na *Equação 3.1*.

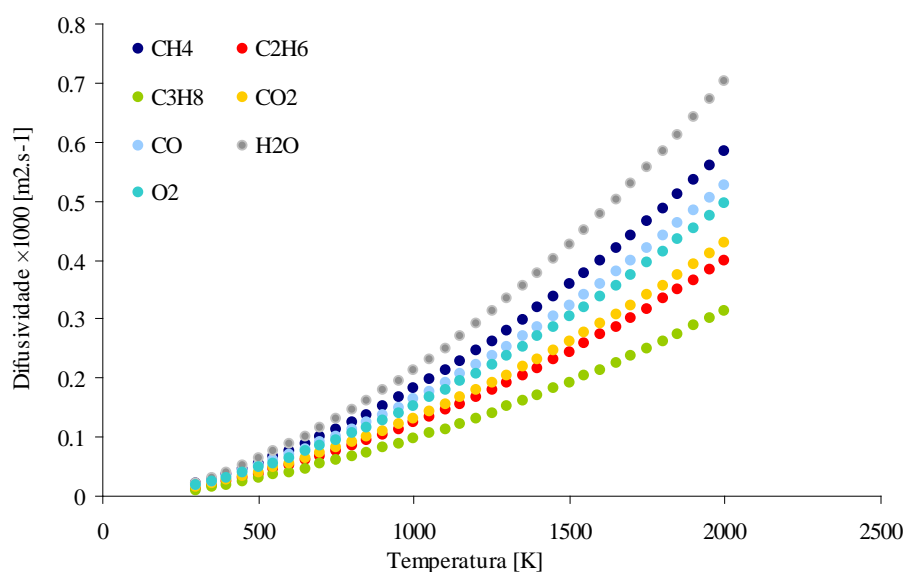
$$D_{i,N_2} = \sum_{j=0}^n A_j T^j \quad \text{Equação 3.1}$$

sendo os parâmetros ( $A_0$ ,  $A_1$  e  $A_2$ ) resultantes desse ajuste mostrados no *Quadro 3.9*.

*Quadro 3.9:* Parâmetros polinomiais para estimativa do coeficiente de difusão mássica das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.

<i>Espécie química</i>	$A_0$ $\times 10^5$	$A_1$ $\times 10^8$	$A_2$ $\times 10^{11}$
CH <sub>4</sub>	-1,8458	9,7415	10,213
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-1,2973	6,6755	6,9838
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-1,0256	5,2427	5,4995
CO <sub>2</sub>	-1,3738	7,1221	7,4808
CO	-1,6142	8,7585	9,2146
H <sub>2</sub> O	-2,4312	11,246	12,523
O <sub>2</sub>	-1,5170	8,1653	8,7018

Com base nestes parâmetros apresenta-se, na *Figura 3.2*, o comportamento da propriedade difusividade mássica, em função da temperatura.



*Figura 3.2:* Variação da difusividade mássica em função da temperatura.

### 3.2.4 Conductividade térmica

A conductividade térmica da mistura condiciona a transferência de calor por condução no interior da fornalha. Embora de reduzida importância, uma vez que não existem zonas de estagnação no domínio de cálculo, os parâmetros polinomiais apresentados no *Quadro 3.10* pretendem contabilizar as relativamente elevadas contribuições da água a elevadas temperaturas e do dióxido de carbono a baixas temperaturas, para a conductividade térmica do gás. Os valores usados nos parâmetros polinomiais foram retirados da bibliografia (“*Encyclopedie des gaz*”, 1976; Miller *et al.*, 1976<sup>‡</sup> e Rohsenow e Hartnett, 1973). Para os parâmetros das espécies etano e propano foi necessário recorrer a estimativas para valores de temperatura superiores a 1000 e 1250 K, respectivamente, o que foi feito através da utilização do *Método de estimativa de Toy e Thodos* (Reid *et al.*, 1987) e do *Método de Chung et al.* (Reid *et al.*, 1987), também respectivamente, alargando a gama de utilização da expressão até cerca de 2000 K.

*Quadro 3.10:* Parâmetros polinomiais para estimativa da conductividade térmica das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.

<i>Espécie química</i>	$A_0$ $\times 10^2$	$A_1$ $\times 10^5$	$A_2$ $\times 10^8$
CH <sub>4</sub>	-0,84168	13,05	4,3953
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-1,2281	7,6447	9,6741
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-4,0972	18,377	-0,9783
CO <sub>2</sub>	-1,2388	10,332	-2,3549
CO	0,53938	7,1029	-1,1618
H <sub>2</sub> O	-1,0174	8,8819	-0,936
O <sub>2</sub>	0,31547	8,1880	-1,3074
N <sub>2</sub>	0,58666	7,2432	-1,5106

Com base nestes parâmetros apresenta-se, na *Figura 3.3*, o comportamento da propriedade conductividade térmica, em função da temperatura.



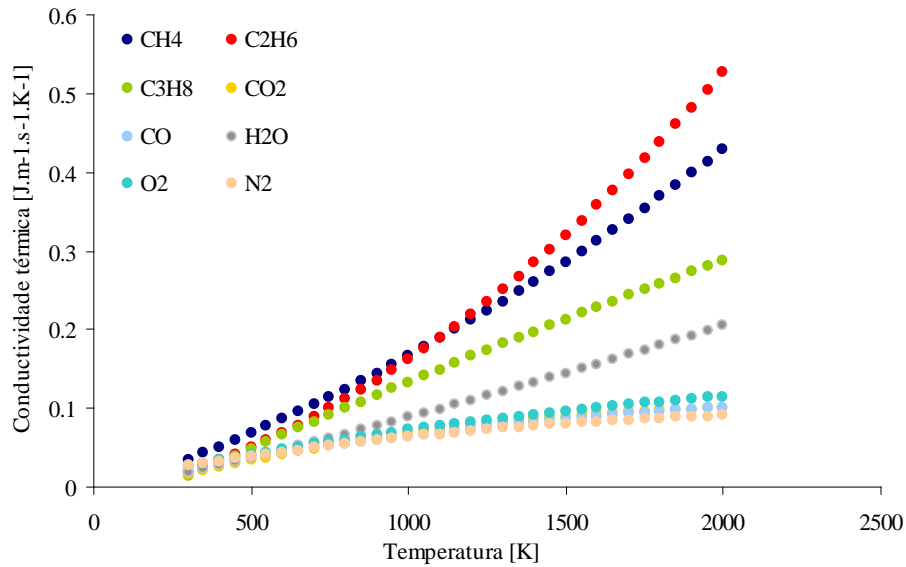


Figura 3.3: Variação da condutividade térmica em função da temperatura.

### 3.2.5 Calor específico

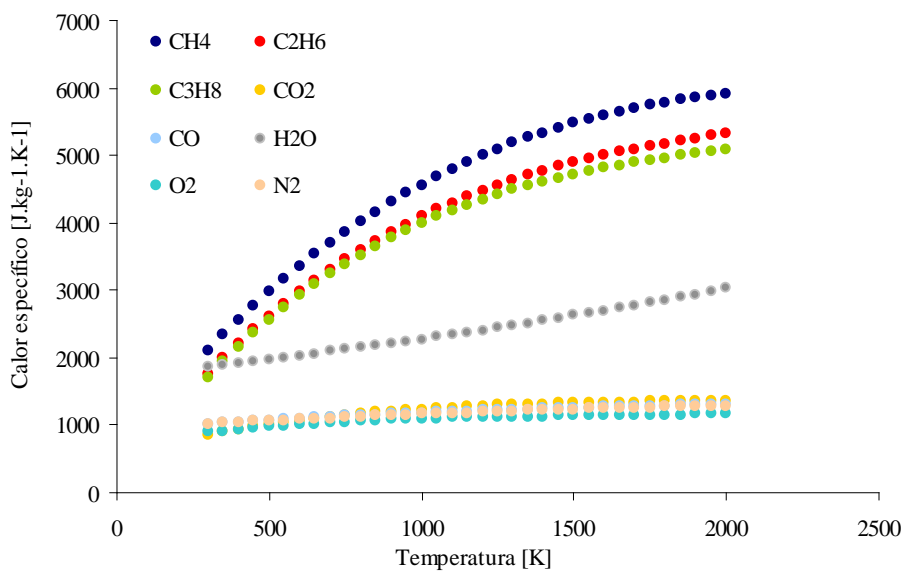
O calor específico das espécies gasosas que constituem a mistura é talvez a mais importante propriedade térmica do gás em termos de modelo numérico. Esta propriedade determina localmente a quantidade de calor que a mistura gasosa tem de absorver para que a sua temperatura se eleve, o que tem implicações em termos de perfis internos de temperatura. Embora o rigor na estimativa desta propriedade seja essencial, visto que a elevadas temperaturas existe um aumento do calor específico de espécies que possam sofrer dissociação como é o caso do  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{O}_2$ , não se considerou necessário contabilizar este fenómeno para a determinação dos parâmetros polinomiais das referidas espécies, tendo em conta que as temperaturas atingidas no interior da fornalha quando se aproximam de valores elevados, fazem-no de uma forma marginal. Os parâmetros determinados são mostrados no *Quadro 3.11*.

Talvez por ser uma propriedade preponderante, tornou-se mais fácil a obtenção de valores experimentais através da bibliografia (Rohsenow e Hartnett, 1973; “*Gas heat capacity*”, 1987; “*Encyclopedie des gaz*”, 1976; Yaws, 1976; Reid *et al.*, 1987 e Greco *et al.*, 1966), evitando, assim, o recurso a métodos de estimativa de propriedades, que, normalmente, não são tão precisos.

**Quadro 3.11:** Parâmetros polinomiais para estimativa do calor específico das espécies químicas, entre 273 e 2000 K.

Espécie química	$A_0$ $\times 10^{-2}$	$A_1$ $\times 10^1$	$A_2$ $\times 10^4$	$A_3$ $\times 10^7$
CH <sub>4</sub>	5,1438	59,137	-21,279	2,5983
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	1,5793	60,744	-25,455	3,9985
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,66018	6,2764	-28,196	4,6874
CO <sub>2</sub>	5,6767	1,1536	-5,8865	1,0501
CO	9,3929	3,0106	-0,59373	-
H <sub>2</sub> O	17,3	4,4461	1,0065	-
O <sub>2</sub>	7,1164	7,2778	-4,4309	0,972
N <sub>2</sub>	9,4343	2,6165	-0,45306	-

Com base nestes parâmetros apresenta-se, na *Figura 3.4*, o comportamento da propriedade calor específico, em função da temperatura.



**Figura 3.4:** Variação do calor específico em função da temperatura.

### **3.3 Sumário**

Neste capítulo são descritos os ensaios cromatográficos efectuados ao combustível, apresentados os valores obtidos, assim como o resultado das recolhas bibliográficas relativas à variação de diversas propriedades, das espécies químicas presentes na combustão, com a temperatura.

São, também, mostradas figuras com o comportamento de cada propriedade em função da temperatura, para cada espécie química.

Por limitações de equipamento, os resultados das análises cromatográficas não foram conclusivos na determinação da composição elementar da mistura combustível utilizada.

---

# Capítulo IV

## ***4 Instalação experimental***

A parte experimental foi realizada numa fornalha existente nas instalações do laboratório de combustão do Departamento de Tecnologias de Combustão do INETI, adaptada para queimar gás natural, que se mostra na *Figura 4.1* e cujo esquema geral de funcionamento se representa, fora de escala, na *Figura 4.2*.



*Figura 4.1:* Vista geral da instalação utilizada para a realização da parte experimental deste trabalho.

A instalação experimental utilizada na realização deste trabalho teve de ser completamente modificada, visto que a fornalha horizontal disponível funcionava com um queimador de óleos usados ou gasóleo. Como tal, quer o sistema de

alimentação de combustível, quer o de alimentação de comburente tiveram de ser dimensionados e adquiridos, por forma a permitir a combustão de uma mistura idêntica ao gás natural.

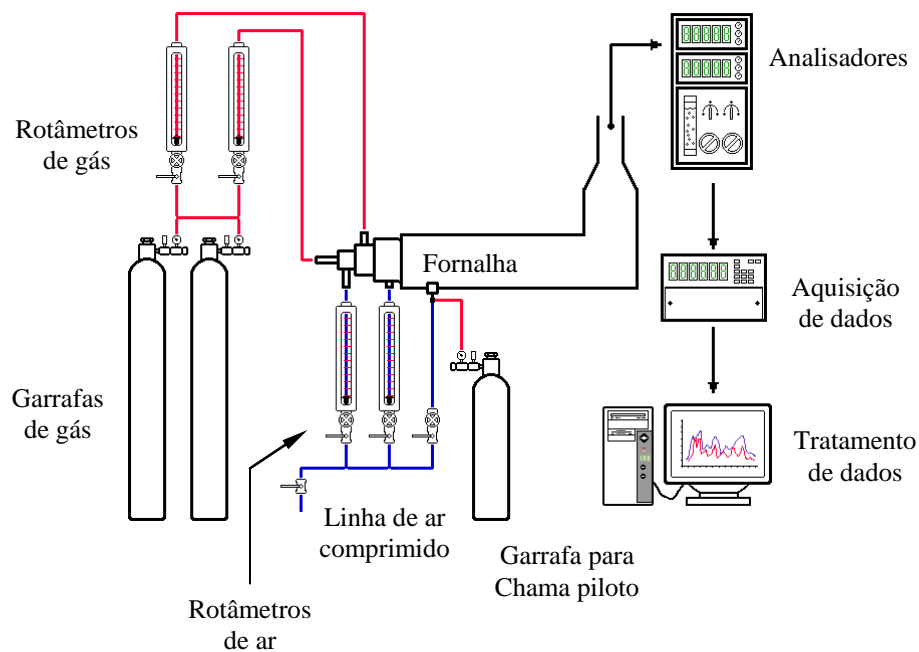


Figura 4.2: Esquema geral da instalação.

Tendo em conta que o anterior combustível utilizado era líquido, não foi possível utilizar nem o depósito de combustível nem a canalização para alimentação do mesmo, o que levou à aquisição de diverso equipamento novo.

#### 4.1 Sistema de alimentação

Nesta secção pretende-se descrever os principais elementos de que é composto o sistema de alimentação de combustível, desde o próprio combustível, que se encontra em garrafas a uma pressão de cerca de 85 bar, passando pelos redutores de pressão, para que o combustível possa ser alimentado ao queimador, até aos caudalímetros de flutuador utilizados para controle da quantidade de combustível a admitir na câmara de combustão, por forma a controlar a potência do queimador bem como o excesso de ar utilizado na combustão.

### 4.1.1 Combustível

O combustível utilizado foi um gás com propriedades idênticas às propriedades médias do gás natural que a Transgás fornece, mostradas no *Quadro 4.1*.

*Quadro 4.1: Composição do gás natural de referência*

<i>Composição</i>	<i>% molar</i>
Metano	83,700
Etano	7,600
Propano	1,920
i-Butano	0,300
n-Butano	0,400
i-Pentano	0,080
n-Pentano	0,090
n-Hexano	0,080
Azoto	5,400
Dióxido de Carbono	0,230
Hélio	0,200

*Fonte: Transgás.*

Com base na composição média da Transgás, foi escolhida a composição descrita no *Quadro 4.2* para o gás utilizado (*Figura 4.3*), embora exista uma diferença na fracção molar do dióxido de carbono que foi incrementado da quantidade de todas as outras espécies que surgem na composição de referência.

*Quadro 4.2: Composição do gás combustível utilizado.*

<i>Composição</i>	<i>% molar</i>
Metano	83,700
Etano	7,600
Propano	1,920
Azoto	5,400
Dióxido de Carbono	1,380

*Fonte: Ar Líquido.*



*Figura 4.3:* Garrafas de combustível com os mano-redutores instalados.

Note-se que apenas as duas garrafas da direita necessitam conter a mistura combustível mencionada, visto que a da esquerda, por ser exclusivamente para a chama piloto, pode conter qualquer combustível gasoso.

#### **4.1.2 Redutores**

Foram utilizadas duas garrafas de combustível, em paralelo, pelo que foram necessários dois redutores, ambos de dois andares, como se ilustra na *Figura 4.3*.

Optou-se pela utilização dois redutores da marca Alpha Gaz, modelo HBS 315/1 com as características que se mostram no *Quadro 4.3*:

**Quadro 4.3:** Características dos redutores.

<i>Características principais</i>	
Modelo	HBS 315/1
Pressão de entrada (max.)	250 bar
Pressão de saída (regulável)	0,05 a 1 bar
Débito nominal, em azoto	2 m <sup>3</sup> /h
<i>Características de construção</i>	
Corpo	Latão cromado
1º Andar	PTFCE
2º Andar	EPDM
Válvulas	Latão
Fole	Bronze
Filtro de entrada	Aço inoxidável
Válvula	Latão cromado
Juntas	EPDM

*Fonte: Alpha Gaz.*

### 4.1.3 Rotâmetros

Tendo em consideração a existência de duas entradas de gás e de ar, foram utilizados quatro rotâmetros (caudalímetros de flutuador) da marca Fischer & Porter, mostrados na *Figura 4.4*, idênticos dois a dois, que a seguir se descrevem no *Quadro 4.4*.

**Quadro 4.4:** Características dos rotâmetros.

Fluido	Ar p = 0 Bar, T = 20 °C	Gás natural p = 0 Bar, T = 20 °C
Modelo	10A1197A	
Dimensão	1''	1/2''
Materiais de construção:		
Tubo	Vidro borossilicato	
Flutuador	aço inox SS 1.4301 (AISI 304)	
“O”-rings	BUNA-N	
Acessórios de ligação	aço inox SS 1.4301 (AISI 304)	
Corpo	aço inox	aço esmaltado
Ligações	roscadas BSP-F	
Gama de medida (caudal efectivo)	0 ~ 22 m <sup>3</sup> /h	0 ~ 50 l/m
Escala de leitura	percentagem (8 ~ 100 %)	
Comprimento de escala	250 mm	
Classe de precisão	1,6	

*Fonte: Contimetra, 1998.*





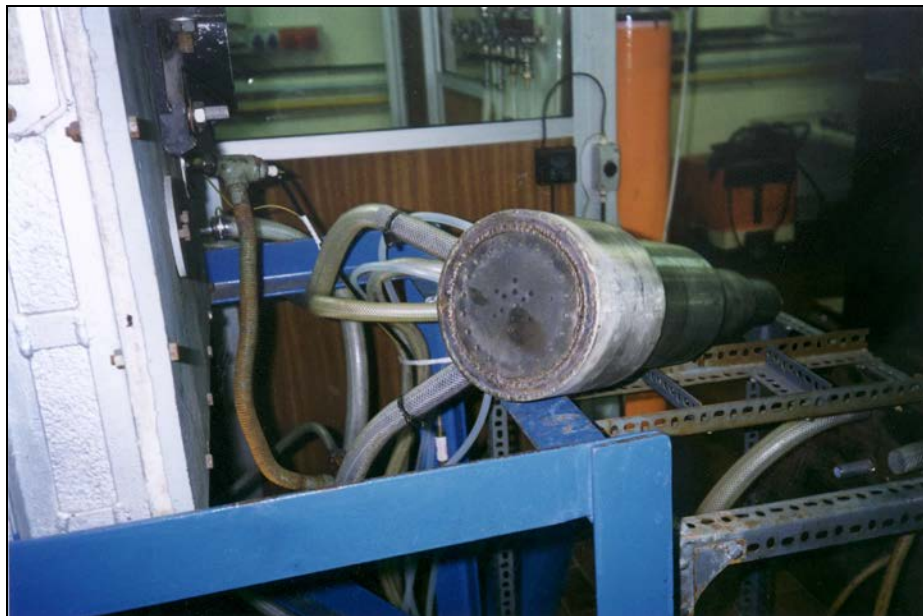
Figura 4.4: Rotômetros para controle dos caudais admitidos na fornalha.

## 4.2 Queimador

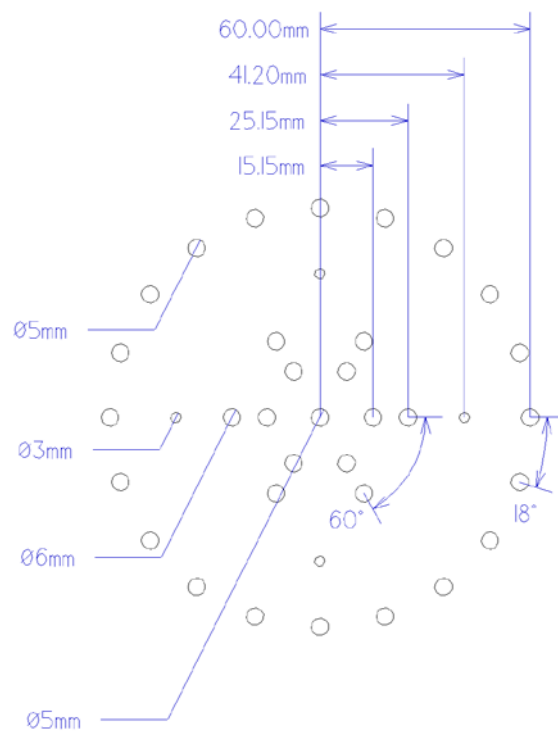
O queimador utilizado é um protótipo concebido pelo Departamento de Tecnologias de Combustão do INETI, para utilizar sem pré-mistura, com o pressuposto de produzir baixas ou “ultra-baixas” emissões de  $\text{NO}_x$ , o que significa emissões com valores abaixo dos 10 ppmv (Cornea e Smooke, 1990) ou abaixo dos 5 ppmv (Gulyurtlu, 1997), respectivamente.

Este queimador é uma peça única (Figura 4.5) composta por quatro entradas concêntricas e independentes de fluido, sendo que no centro tem uma entrada de combustível com um injetor único com 5 mm de diâmetro, no primeiro anel tem doze entradas de ar de 6 mm de diâmetro subdivididas em dois anéis e afastadas entre si  $60^\circ$ , no segundo anel tem quatro entradas de combustível com 3 mm de diâmetro afastadas  $90^\circ$  entre si, no terceiro e último anel tem vinte entradas de ar de 5 mm de

diâmetro colocadas individualmente afastadas  $18^\circ$  entre si, como se mostra na *Figura 4.6* e com as áreas de passagem de fluido descritas no *Quadro 4.5*.



*Figura 4.5:* Queimador protótipo.



*Figura 4.6:* Posição e dimensão dos injectores.

O centro de cada injector encontra-se, respectivamente para cada anel, a 0, a 15,15, a 25,15, a 41,20 e a 60,00 mm de distância do centro do queimador.

*Quadro 4.5: Áreas de passagem de fluido para o interior da câmara de combustão*

<i>Anel</i>	<i>Área [mm<sup>2</sup>]</i>
Combustível interior	19,63
Ar interior (duplo)	339,29
Combustível exterior	28,27
Ar exterior	392,70

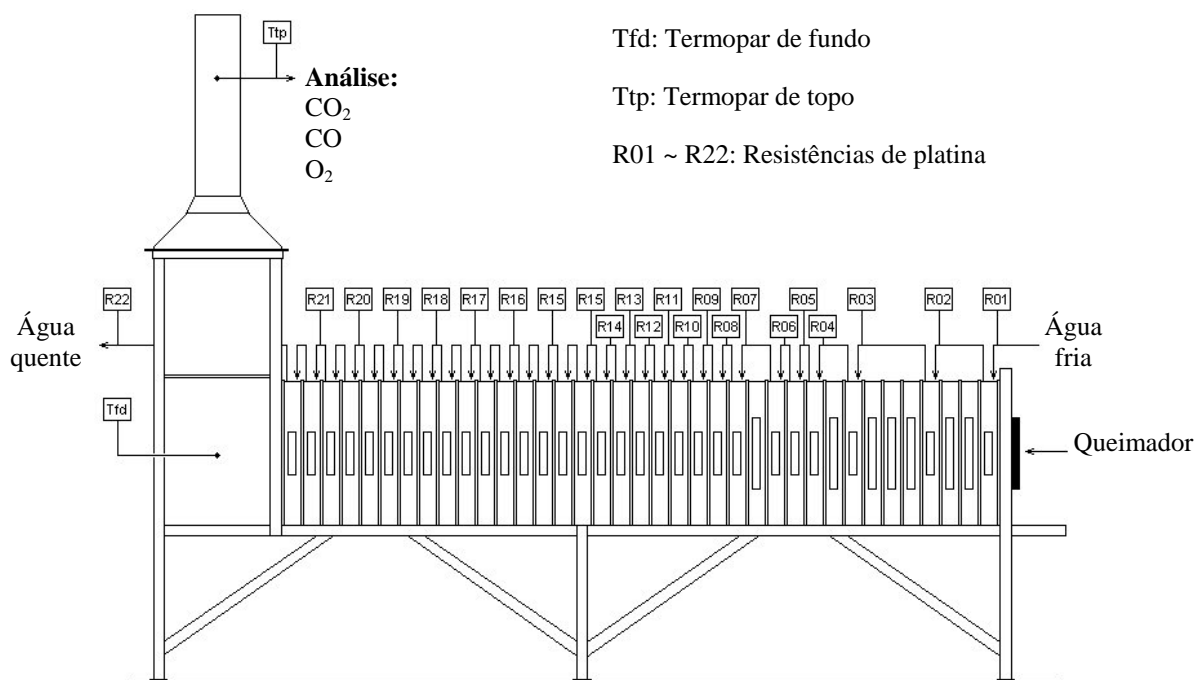
### 4.3 Fornalha

A fornalha consiste numa câmara horizontal de secção quadrada com 0,5 m de lado, pelo interior, e com 4,60 m de comprimento, provida de paredes arrefecidas a água. Na extremidade da fornalha foi acoplada uma flange para inserção do queimador, como mostrado na *Figura 4.7*.



*Figura 4.7: Fornalha com queimador instalado.*

A fornalha é constituída por 37 módulos de secção quadrada com 0,5 m de lado e 0,1 m de espessura, unidos entre si por flanges e isolamento, como mostrado na *Figura 4.8*. O interior das paredes de cada módulo consiste numa estrutura tubular de duas passagens para circulação de água de arrefecimento, sendo a comunicação assegurada entre cada módulo por tubos flangeados. À entrada de cada módulo e na entrada e saída da fornalha existem orifícios destinados à colocação de resistências de platina para monitorização da temperatura da água de arrefecimento ao longo da fornalha.



*Figura 4.8:* Esquema da fornalha.

Nos módulos 2, 3, 5, 6, 7, 9 e 13, bem como no fundo da fornalha, existem visores que permitem observar o interior da câmara de combustão.

A câmara termina numa estrutura cúbica de 0,5 m de lado, também com circulação de água, que liga o corpo da fornalha à conduta de exaustão.

A conduta de exaustão possui secção circular, com 0,247 m de diâmetro interno, sendo isolada e revestida a chapa metálica até cerca de 4,5 m de altura.

A cerca de 4 m de altura do solo existe uma plataforma para suporte de trabalhos na chaminé, conforme se pode ver na *Figura 4.9*.



*Figura 4.9:* Plataforma para trabalhos na chaminé.

#### **4.4 Sistema de refrigeração**

A água utilizada para arrefecimento da fornalha é proveniente da rede pública de abastecimento de água e armazenada num tanque. Na prática, dependendo do caudal de água que se pretende alimentar, a água proveniente da rede passa uns minutos dentro do tanque, visto que o tanque está munido de uma válvula de agulha de actuação mecânica através de bóia, que se fecha quando o nível de água no tanque é elevado, deixando, assim, de alimentar água e ficando a fornalha a consumir a água existente no tanque, até que o nível volte a baixar e a válvula reabra.

A circulação de água é forçada através de uma bomba da marca DP Motors com potência de 40 kW, rotação máxima de 2860 rpm e um consumo de cerca de 8,3 A, mostrada na *Figura 4.10*. O caudal de água a alimentar na fornalha é controlado por um caudalímetro magnético da marca Fischer & Porter, com um consumo de cerca de 0,05 A e é regulado por uma válvula de agulha de actuação mecânica.



Figura 4.10: Bomba para circulação da água de refrigeração.

#### 4.5 Analisadores

Os analisadores, Modelo CFA-321 e Modelo CMA-331A, da Horiba (*Figura 4.11*), foram concebidos para analisar, respectivamente, gases de combustão e oxigénio. Incorporam, respectivamente, um analisador infravermelho não-dispersivo para medições de componentes em amostras contínuas e um analisador paramagnético.

No que respeita ao CFA-321, sabe-se que as moléculas constituídas por diferentes átomos absorvem infravermelhos nos comprimentos de onda específicos de cada um dos constituintes e que gases a pressão constante absorvem uma quantidade de infravermelhos correspondente às suas concentrações. Baseado neste princípio, este analisador utiliza a absorção de infravermelhos dos componentes a serem medidos e mede continuamente as alterações na concentração desses componentes. As características deste analisador são mostradas no *Quadro 4.6*.

Em relação ao CMA-331A, quando existe oxigénio num campo magnético desigual, este é atraído na direcção do campo mais forte, consequentemente, a pressão nessa



zona aumenta. A subida de pressão de um lado da câmara faz diminuir a pressão do lado do detector de condensador, que, posteriormente, é convertida num sinal eléctrico. Este princípio é aplicado, apenas, para o oxigénio.



Figura 4.11: Analisadores utilizados para monitorização dos gases de combustão.

Quadro 4.6: Características dos analisadores de gases.

Modelo	CFA-321 e CMA-331A		
Princípio de medida	Método de análise por infravermelhos não-dispersivos		
	Método de análise do tipo paramagnético (para O <sub>2</sub> )		
Gammas	Standard		
	Constituinte	Gama min.	Gama Max.
	O <sub>2</sub>	0-10 vol %	0-25 vol %
	CO <sub>2</sub>	0-10 vol %	0-50 vol %
	CO	0-1000 ppm	0-0,5 vol %
Reproductibilidade	± 0,5 % do valor máximo da escala		
Desvio do Zero	± 1,0 % do valor máximo da escala		
Desvio da Calibração	± 2,0 % do valor máximo da escala		
Velocidade de resposta	Dentro de 30 s para 90 % da reacção à análise da admissão		
Visor	Light Emissor Diode digital (3.5 dígitos efectivos)		
Gás medido	0,5-0,6 l/min		
Temperatura Ambiente	0-40 °C		
Sinal de saída	DC 0-16 mA ou 4-20 mA		
	DC 0-1 V com 100 Ω de impedância		
Peso	aprox. 15 kg		

Fonte: Horiba, 1992.

#### ***4.6 Aquisição de dados***

O terminal de aquisição de dados é constituído por uma unidade, programável, de recepção e tratamento dos sinais provenientes dos sensores, da marca Yokogawa modelo DA 2500 E, com sessenta canais e placa RS 232-C, para ligação a computador IBM-compatível, onde, posteriormente, se procede ao tratamento dos dados.

Para tratamento dos dados provenientes da fornalha, foi desenvolvido, no Departamento de Tecnologias de Combustão, um programa de aquisição de dados e cálculo, denominado “Yoko” (André, 1991), que permite visualizar, no monitor, o esquema simplificado da instalação e todas as variáveis medidas, durante o funcionamento da fornalha, bem como diagramas úteis à análise do processo de combustão (*Figura 4.12*).



*Figura 4.12: Sistema de aquisição de dados.*

Incluído neste programa existe, ainda, uma adaptação do programa de cálculo “Comb” (Monteiro, 1989), também realizado pelo Departamento de Tecnologias de Combustão do INETI, que executa os balanços de energia e massa e procede à análise da eficiência térmica da fornalha.



#### **4.7 Sumário**

Neste capítulo são descritos os principais equipamentos utilizados na obtenção dos resultados a usar na validação dos modelos numéricos. Entre os equipamentos mencionados encontra-se a alimentação do combustível, o queimador, a própria fornalha, os analisadores, a aquisição e o tratamento de dados.

É de notar que apesar da fornalha utilizada existir no Departamento de Tecnologias de Combustão do INETI, queimava óleos usados ou gasóleo. Portanto, toda a restante instalação teve de sofrer alterações, desde o combustível, que não existia, até ao queimador, protótipo nunca testado, passando pelos rotâmetros, válvulas de corte e regulação, e válvulas anti-retorno.

---

# Capítulo V

## ***5 Ensaaios para validação do modelo numérico***

Por forma a validar o modelo numérico que se pretende desenvolver é necessário que existam valores experimentais que permitam comparar os resultados numéricos com o caso real. Estes ensaios para validação, por si só, não garantem que o modelo seja válido para determinado processo, mas sim válido para determinado processo dentro da gama de funcionamento dos ensaios de validação que foram realizados e com os quais foi possível comparar os resultados com o modelo numérico.

Como pontos indispensáveis a controlar, em cada ensaio de validação, encontra-se o combustível e o comburente, no que respeita às entradas do sistema, e os gases de combustão, temperatura e composição, no que respeita à saída do sistema.

Muito importante é, também, a realização de balanços mássicos à fronteira do sistema, por forma a determinar da existência de entradas de ar parasita, bem como o calor transmitido à água de refrigeração da fornalha, que por arrefecer a mesma vai retirando calor ao sistema, podendo, com isso, afectar a composição elementar e temperatura dos gases de combustão.

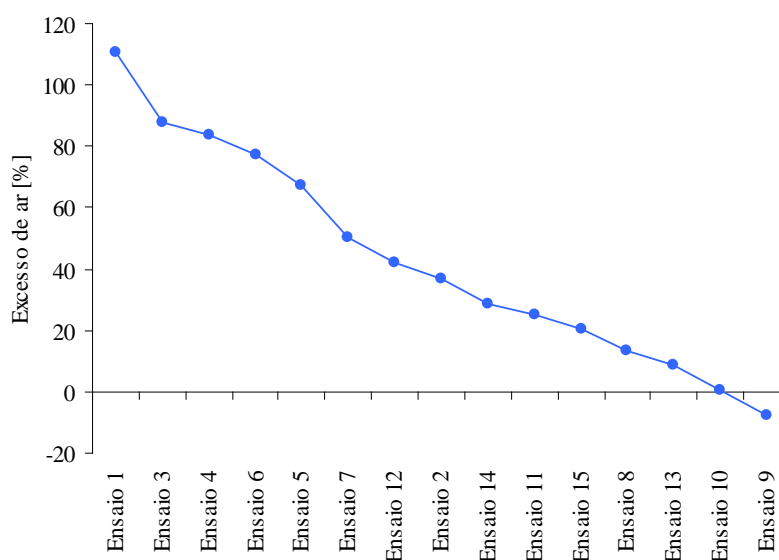
Foram, portanto, realizados 15 ensaios, tentando abranger a maior gama de funcionamento possível. Embora este número de ensaios se possa apresentar como não muito alargado, condicionantes houve que levaram a esta limitação, nomeadamente a não existência de um abastecimento, contínuo e em quantidade, do combustível utilizado.

Visto que se encontravam disponíveis cerca de 30 m<sup>3</sup> de gás para realizar os referidos ensaios e que cada ensaio tinha um consumo médio global de cerca de 1,9 m<sup>3</sup>, verifica-se que dificilmente se

conseguiria realizar um maior número de ensaios. Embora, apesar do custo avultado de cada garrafa de gás, a disponibilidade do gás apenas se encontrasse dependente do abastecimento do mesmo pela Ar líquido, abastecimento este que demorava, no mínimo, três semanas, prazo mencionado pelo fornecedor que, na prática, nunca foi cumprido.

### 5.1 Condições de funcionamento

Foram realizados 15 ensaios, que devido às condições utilizadas, muito diferentes, se caracterizam por excessos de ar que variam desde valores de cerca de 110 % até cerca de -8 %, como se mostra na *Figura 5.1*.



*Figura 5.1:* Excesso de ar utilizado nos ensaios de validação realizados, por ordem decrescente de excesso de ar.

Os resultados destes ensaios vão condicionar a gama de funcionamento, segundo a qual o modelo será válido, daí que se tenha tentado abranger uma alargada gama de funcionamento, inclusive em zonas de funcionamento com baixo excesso de ar ou, mesmo, defeito.

Durante a realização dos ensaios de validação foi medida a temperatura dos gases na conduta de exaustão dos fumos, o caudal de ar alimentado pelos anéis interior e exterior (caudalímetros de flutuador), e os teores de oxigénio, dióxido e monóxido de carbono presentes nos gases de

combustão (base seca). O combustível alimentado pelos anéis interior e exterior foi, também, controlado através de caudalímetros de flutuador. São mostrados, no *Quadro 5.1*, as condições, em termos de caudais, e respectivo excesso de ar, para cada ensaio e para todos os anéis de injectores.

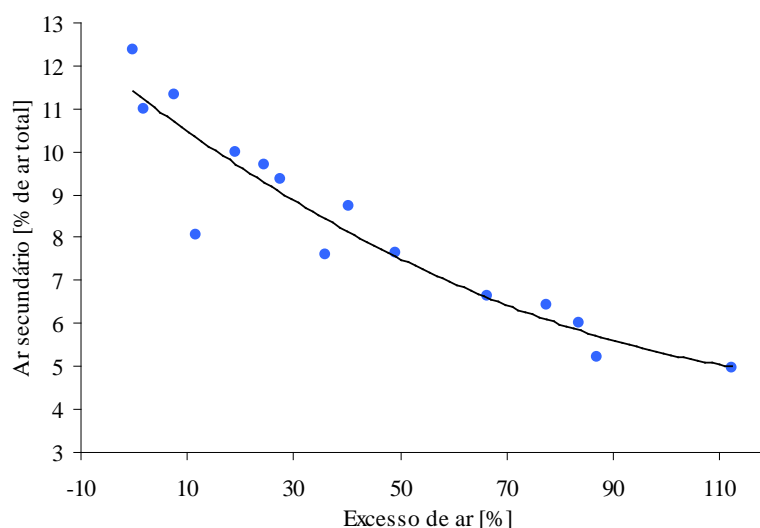
*Quadro 5.1: Condições à entrada da fornalha.*

<i>Ensaio Nº</i>	<i>Gás interior [l.min-1]</i>	<i>Gás exterior [l.min-1]</i>	<i>Ar interior [l.min-1]</i>	<i>Ar exterior [l.min-1]</i>	<i>e [%]</i>
1	11,4	11,8	183,3	286,0	110,5
2	11,0	11,8	117,3	183,3	37,1
3	12,2	14,1	183,3	289,7	87,5
4	11,4	11,4	146,7	256,7	83,9
5	11,4	11,4	146,7	220,0	67,2
6	11,4	11,4	166,8	221,8	77,2
7	11,4	11,4	110,0	220,0	50,5
8	15,0	15,3	110,0	220,0	13,2
9	11,6	11,6	93,5	111,8	-7,9
10	11,4	11,4	91,7	128,3	0,3
11	11,4	11,4	128,3	146,7	25,4
12	11,4	11,4	146,7	165,0	42,1
13	11,4	11,4	110,0	128,3	8,7
14	11,4	11,4	132,0	150,3	28,7
15	11,4	11,4	113,7	150,3	20,4

A existência de entradas de ar parasita na fornalha, não contabilizadas, foi determinada através da realização de diversos balanços mássicos à fornalha, em cada ensaio. Quando eram efectuadas as tomadas de valores nos rotâmetros e no sistema de aquisição de dados tornava-se possível realizar um balanço à fornalha, permitindo, assim, tomar conhecimento da não estanqueidade da câmara de combustão.

Cada ensaio que era efectuado implicava a execução de determinados passos. Começava-se por regular os caudais pretendidos, deixava-se estabilizar a fornalha, fase que durava cerca de 30 a 45 minutos se a fornalha já estivesse quente e cerca de hora e meia se estivesse fria, retiravam-se vários conjuntos de valores, de 10 em 10 minutos durante meia hora, procedia-se à realização da

média entre os valores recolhidos e calculava-se o ar secundário, que chegava a atingir cerca de 12 %, em volume, de todo o ar admitido na câmara, como se mostra na *Figura 5.2*.



*Figura 5.2:* Entrada de ar secundário na fornalha, em função do excesso de ar corrigido.

## 5.2 Análise dos gases de combustão

Como a combustão se dá numa zona muito restrita da fornalha, nos cerca de primeiros 50 cm, o ar secundário foi considerado, apenas, como elemento de diluição, ou seja, sem influência na combustão. Apresenta-se, no *Quadro 5.2*, a composição dos gases antes da correcção.

Com base no *Quadro 5.2* foram realizadas correcções aos valores medidos, retirando, então, o ar secundário, donde se obteve os valores mostrados no *Quadro 5.3*. Tornou-se, então, necessário calcular o excesso de ar resultante da correcção, o que foi efectuado através da utilização do Diagrama de Ostwald, como se exemplifica na *Figura 5.3*.

**Quadro 5.2:** Composição e temperatura dos gases (base seca)  
à saída da câmara de combustão, sem correcção.

<i>Ensaio</i>	<i>e</i> [%]	<i>T Chaminé</i> [°C]	<i>O<sub>2</sub></i> [% vol]	<i>CO<sub>2</sub></i> [% vol]	<i>CO</i> [ppmv]	<i>Ar secundário</i> [%]
1	122,8	417	12,30	5,60	3,46	4,99
2	46,2	542	7,23	8,14	9,59	7,59
3	96,7	450	11,08	6,34	4,39	5,21
4	94,5	473	10,94	6,36	4,51	6,02
5	77,4	500	9,86	6,84	5,78	6,66
6	88,9	490	10,55	6,34	5,02	6,44
7	60,7	540	8,59	7,48	7,23	7,64
8	20,5	615	4,11	10,22	20,72	8,08
9	12,4	473	2,58	10,48	201,31	12,36
10	14,4	513	2,59	9,63	176,02	12,09
11	36,6	612	6,15	8,68	12,51	9,70
12	52,8	591	7,93	7,94	8,53	8,75
13	20,1	594	3,96	10,03	25,57	11,33
14	39,6	594	6,52	8,55	11,37	9,36
15	31,0	627	5,52	9,20	14,37	9,99

**Quadro 5.3:** Composição e temperatura dos gases (base seca)  
à saída da câmara de combustão, após correcção.

<i>Ensaio</i>	<i>e</i> [%]	<i>T Chaminé</i> [°C]	<i>O<sub>2</sub></i> [% vol]	<i>CO<sub>2</sub></i> [% vol]	<i>CO</i> [ppmv]
1	112,3	438	11,85	5,89	3,64
2	35,9	585	6,11	8,81	10,38
3	87,0	474	10,54	6,69	4,63
4	83,4	502	10,30	6,77	4,80
5	66,2	534	9,07	7,33	6,19
6	77,3	523	9,83	6,78	5,36
7	49,2	583	7,57	8,10	7,83
8	11,5	667	2,63	11,12	22,54
9	- 0,2	538	0	11,96	229,70
10	1,8	582	0,07	10,96	200,23
11	24,3	676	4,57	9,62	13,86
12	40,3	646	6,69	8,71	9,34
13	7,6	601	1,80	11,32	28,84
14	27,5	654	5,04	9,43	12,54
15	19,0	695	3,82	10,22	15,97

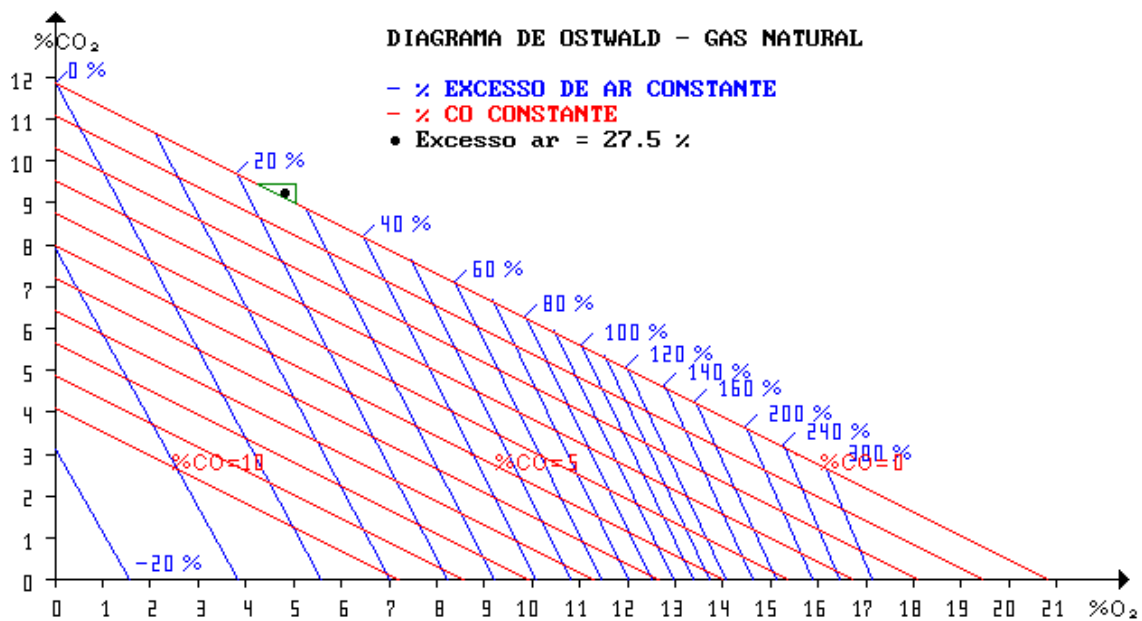


Figura 5.3: Diagrama de Ostwald, com base em valores provenientes do Ensaio 14.

Com base nos valores apresentados no Quadro 5.3, apresentam-se as Figuras 5.4 a 5.9 com a variação dos gases de combustão em função do excesso de ar e da temperatura dos gases de combustão.

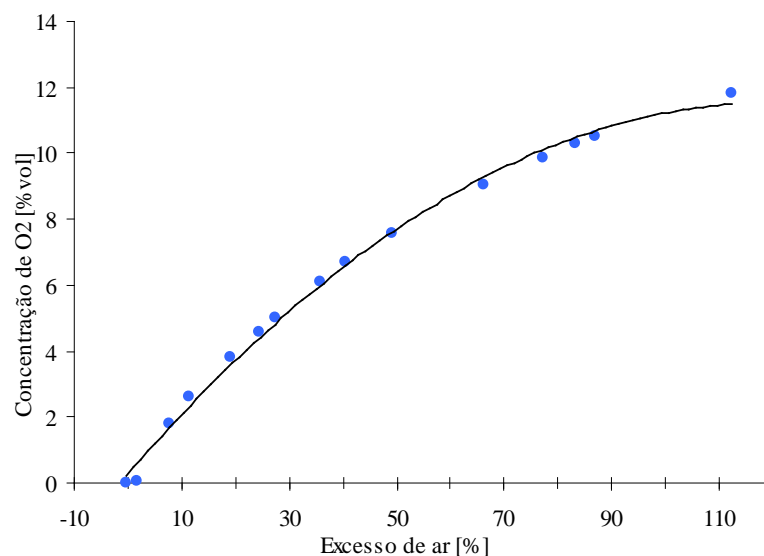


Figura 5.4: Concentração de O<sub>2</sub> nos gases de combustão (base seca) em função do excesso de ar.

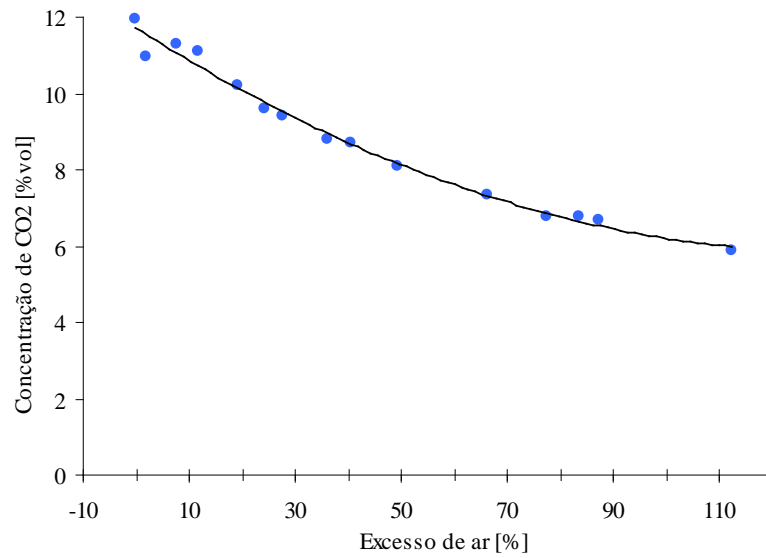


Figura 5.5: Concentração de  $\text{CO}_2$  nos gases de combustão (base seca) em função do excesso de ar.

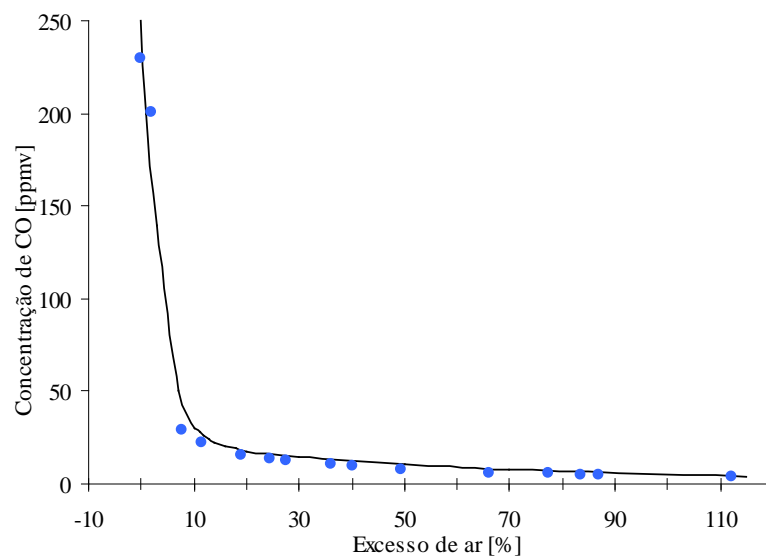


Figura 5.6: Concentração de  $\text{CO}$  nos gases de combustão (base seca) em função do excesso de ar.



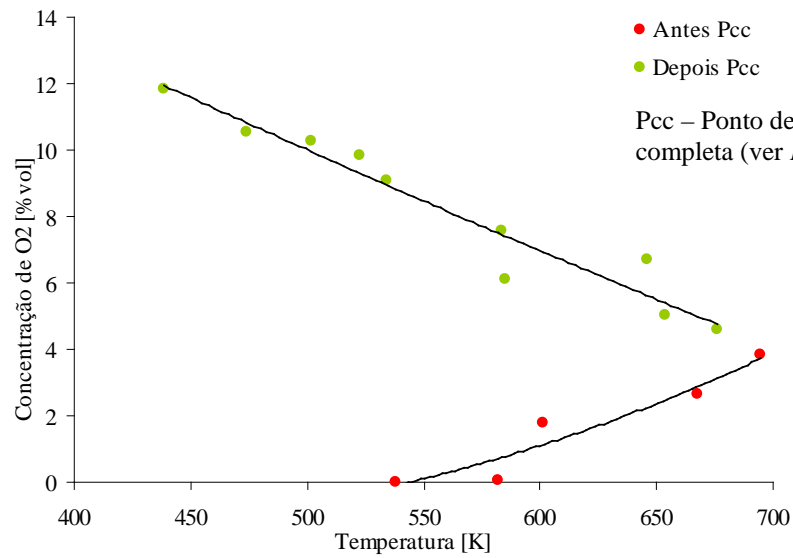


Figura 5.7: Concentração de  $O_2$  nos gases de combustão (base seca) em função da temperatura dos gases de combustão.

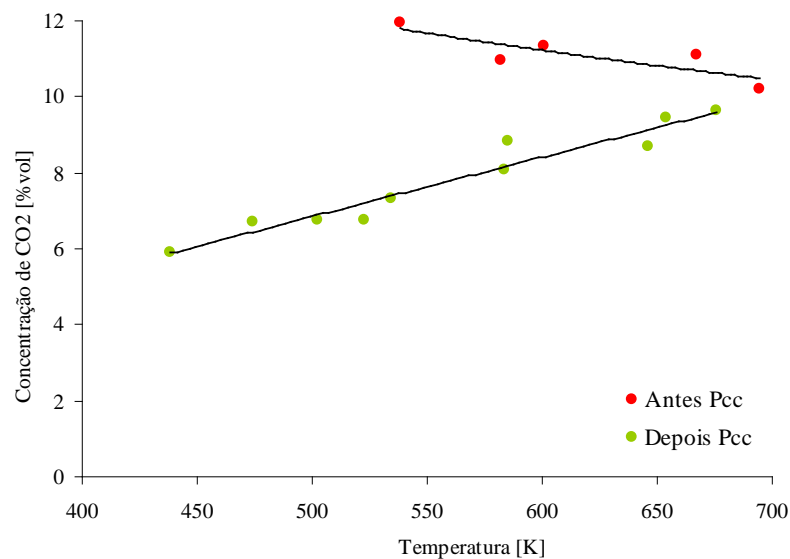


Figura 5.8: Concentração de  $CO_2$  nos gases de combustão (base seca) em função da temperatura dos gases de combustão.

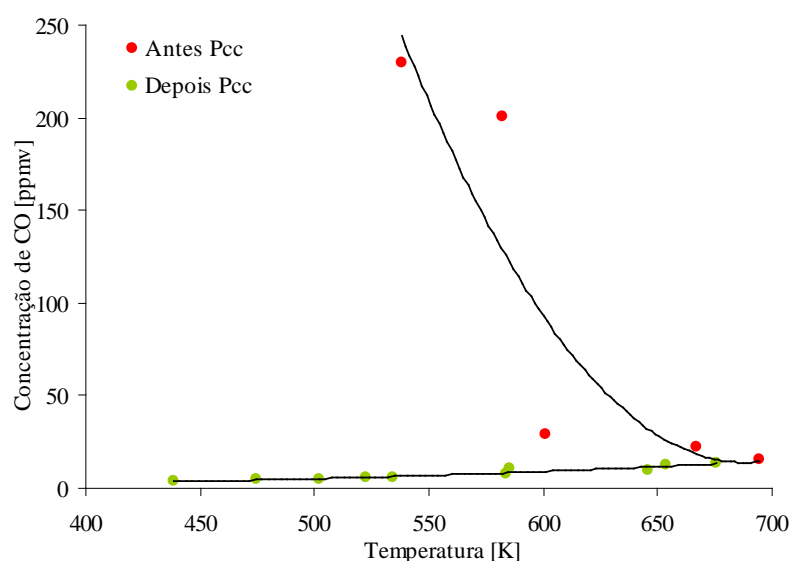


Figura 5.9: Concentração de CO nos gases de combustão (base seca) em função da temperatura dos gases de combustão.

Considerando a composição da mistura utilizada, foram calculados, como necessários para uma combustão estequiométrica, a massa de 14,80 kg e o volume de 9,62 m<sup>3</sup> por, respectivamente, kg e m<sup>3</sup> de gás natural. Não foram efectuados cálculos à humidade do ar, visto que o ar é alimentado através de um compressor, com um secador na linha, que produz ar comprimido com cerca de 0,003 kg de água por kg de ar seco.

### 5.3 Transmissão de calor

Os principais fenómenos de transmissão de calor a considerar, neste caso, são a radiação e a convecção. Na impossibilidade de calcular separadamente cada um deles, foram estimados valores para as perdas de calor através das paredes (*Quadro 5.4*), com base na temperatura e caudal da água, à entrada e à saída da fornalha, medida em cada ensaio, como se pode observar na *Figura 5.10*.

Quadro 5.4: Calor transmitido à água de arrefecimento da fornalha.

Ensaio	Calor [kW]	Ensaio	Calor [kW]
1	9,69141	9	7,598443
2	7,923517	10	7,288295
3	8,023167	11	7,220431
4	7,813975	12	7,145936
5	7,374259	13	6,980876
6	7,140773	14	6,883877
7	6,948969	15	6,888416
8	7,384039		

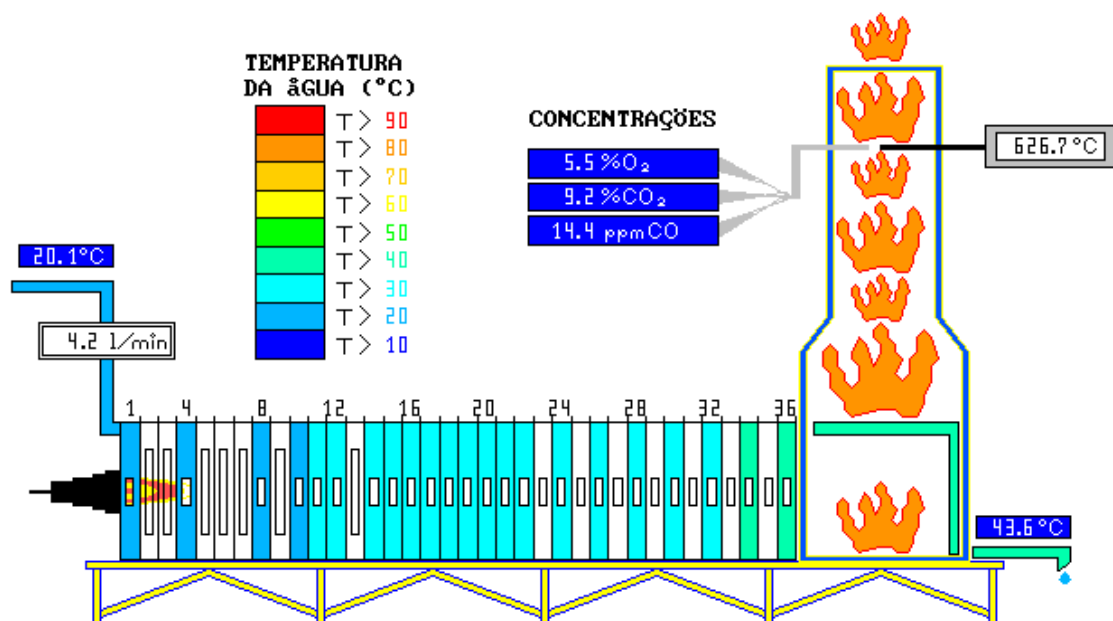
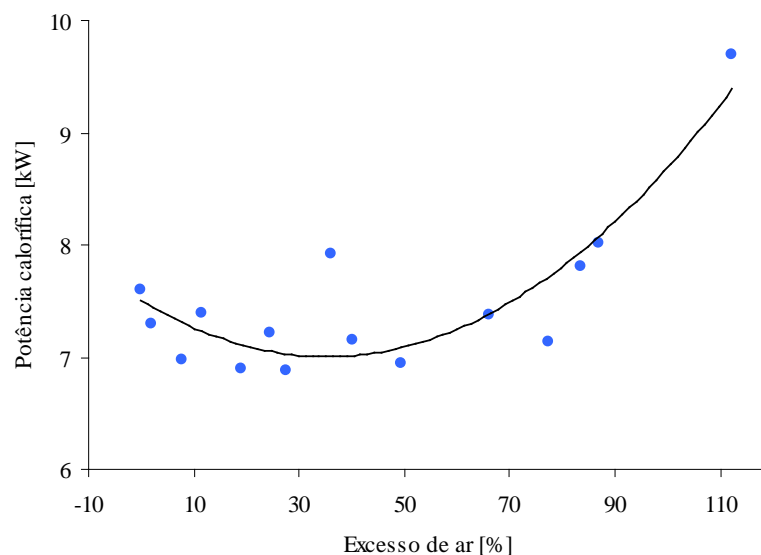


Figura 5.10: Principais parâmetros monitorizados pelo sistema de aquisição de dados (valores provenientes do Ensaio 15).

O cálculo da transmissão de calor, por unidade de tempo, foi realizado através da aplicação da *Equação 5.1*:

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot C_p \cdot \Delta T \quad (\text{Equação 5.1})$$

Onde a potência calorífica,  $\dot{Q}$ , é determinada através do produto do caudal de água,  $\dot{m}$ , pelo seu calor específico e pela variação de temperatura,  $\Delta T$ . Dentro dos limites analisados verifica-se uma tendência para a redução da quantidade de calor perdido com a diminuição do excesso de ar de combustão (*Figura 5.11*) ou com o aumento da temperatura dos gases (*Figura 5.12*). Em condições de fluxo de ar superior ao estequiométrico, o excesso de ar tem, teoricamente, uma acção de redução das temperaturas da fornalha e em consequência uma diminuição das perdas de calor para o exterior. Admitindo que a temperatura de saída dos gases da fornalha traduz uma temperatura média da fornalha, é igualmente possível estabelecer uma relação praticamente linear entre a temperatura e o excesso de ar da combustão (*Figura 5.13*).



*Figura 5.11:* Potência calorífica transmitida à água, em função do excesso de ar.

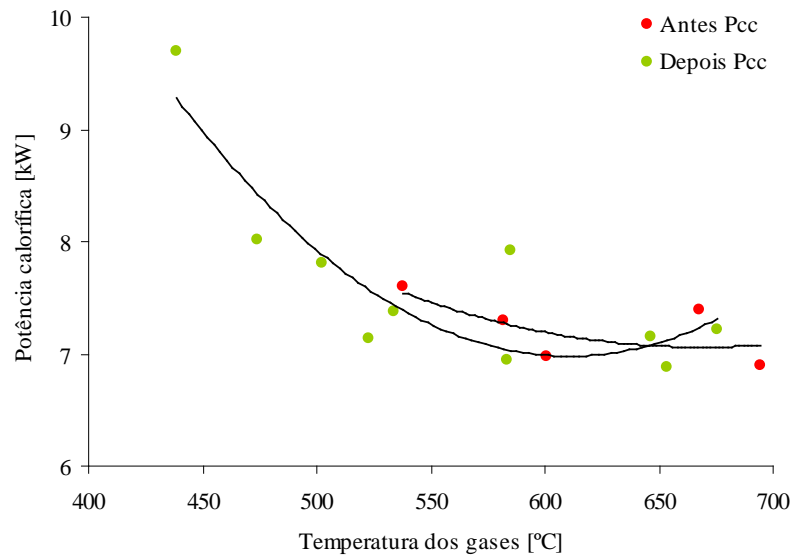


Figura 5.12: Potência calorífica transmitida à água, em função da temperatura dos gases de combustão.

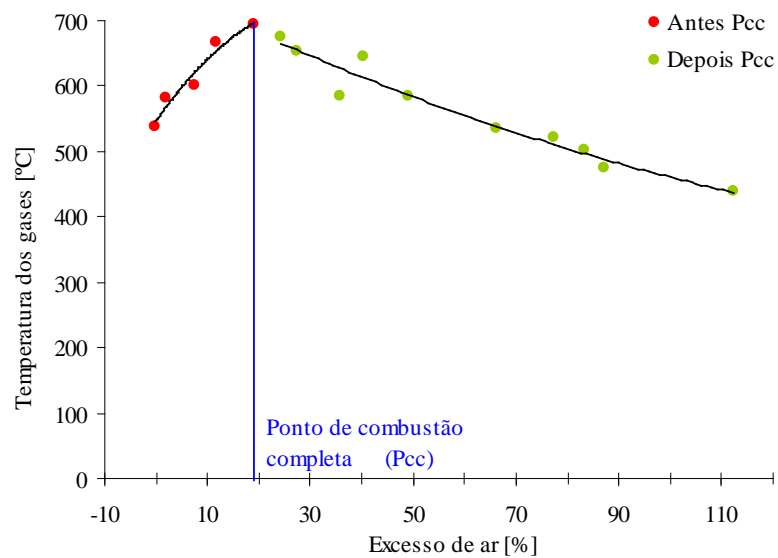


Figura 5.13: Temperatura dos gases de combustão em função do excesso de ar.

## **5.4 Sumário**

Neste capítulo são descritas as condições experimentais existentes para a obtenção dos resultados a utilizar na validação do modelo numérico que se apresenta no *Capítulo VII*.

Com base nos valores dos ensaios de validação, foram efectuados balanços mássicos que pretenderam corrigir os caudais de ar medidos experimentalmente, que incluíam a existência de ar secundário.

São determinados os excessos de ar, corrigidos, através de Diagramas de Ostwald e apresenta-se o comportamento dos gases de combustão, bem como a evolução da temperatura dos mesmos.

Com base na temperatura da água de arrefecimento da fornalha, foram efectuados balanços à transmissão de calor para água.

# Capítulo VI

## **6 Parâmetros de modelação**

Antes de começar a calcular o caso que se pretende modelar, há que adaptá-lo ao código utilizado. Como tal justifica-se um capítulo só para escolher os modelos e as condições preferenciais para a simulação a partir das possibilidades existentes no código. Dos modelos possíveis de utilizar foi realizada uma escolha criteriosa de quais testar, o que, praticamente, conduziu, em termos gerais, aos modelos de turbulência e radiação, descritos no *Capítulo II*, bem como ao teste da própria malha a utilizar, por forma a permitir a independência dos resultados em relação à mesma, e do modelo de combustão que mais se aproxime do caso a estudar.

### **6.1 Malha computacional**

Após a criação da geometria da fornalha que se pretende modelar (no programa *DDN* v3.3.01), foi necessário utilizar dois programas diferentes para criar a malha, propriamente dita, visto ser uma malha tridimensional constituída apenas por tetraédros, o que aconteceu porque a geometria que se pretendia representar não apresentava grandes complexidades e, como tal, não necessitou de uma malha híbrida.

Como acima mencionado foram necessários dois programas (*P-Cube* v3.3.01 e *T-Grid* v3.4) para a criação da malha ajustada à geometria. O primeiro para criar uma malha bidimensional para representar a face da fornalha onde se encontram os injectores e o segundo para criar toda a restante malha, ou seja o volume da câmara de combustão, excepto a parte anteriormente realizada. Após as duas partes estarem criadas procedeu-se à fusão das duas malhas, o que foi, também, realizado no segundo programa, e os consequentes ajustes dos nós comuns que mantém, sempre, certas

discrepâncias. Após a criação dos limites da malha, o trabalho encontra-se mais simplificado visto que só é necessário preencher o interior, o que é feito de forma automática, sem controle do utilizador, visto que, anteriormente, se havia definido a quantidade de nós existentes nas fronteiras, bem como a sua distribuição.

Além das dificuldades inerentes à utilização de coordenadas que permitam adaptar a malha à geometria do equipamento, é necessário reticular o domínio de cálculo com um número de células que garantam a independência dos resultados obtidos, relativamente à grelha construída. A utilização de um grande número de células é, normalmente, a estratégia seguida quando se pretendem realizar poucas simulações. Neste trabalho, tendo como objectivo testar uma variedade significativa de condições de funcionamento da fornalha, a utilização de malhas muito reticuladas torna o cálculo bastante demorado. Foi, então, feita a opção de empregar menos células, construindo, assim, uma malha não uniforme, o que permitiu reduzir os volumes de controle na zona de entrada do escoamento, consequentemente na zona de chama, aumentando-os em zonas da malha onde o escoamento não tenha variações significativas.

Foram construídas três malhas distintas, representativas da fornalha, a primeira, pouco ambiciosa, é formada por 31 067 células (*Figura 6.1*), a segunda, com 78 003 células já tem uma dimensão significativa, em termos de esforço computacional, e uma terceira, com 120 000 células, que se torna bastante complicada de utilizar.

Todas estas malhas foram testadas com um escoamento isotérmico de azoto, a ser admitido pelos injectores e a sair pela chaminé, tal como os escoamentos a simular, por forma a permitir a comparação de resultados, no que respeita a diferenças nas velocidades do escoamento.

Para ser possível comparar os resultados foram definidos alguns planos na malha da fornalha, que se representam na *Figura 6.2*. Estes planos, quando comparados com cada uma das malhas testadas, apresentam, de uma forma geral, resultados diferenciados.



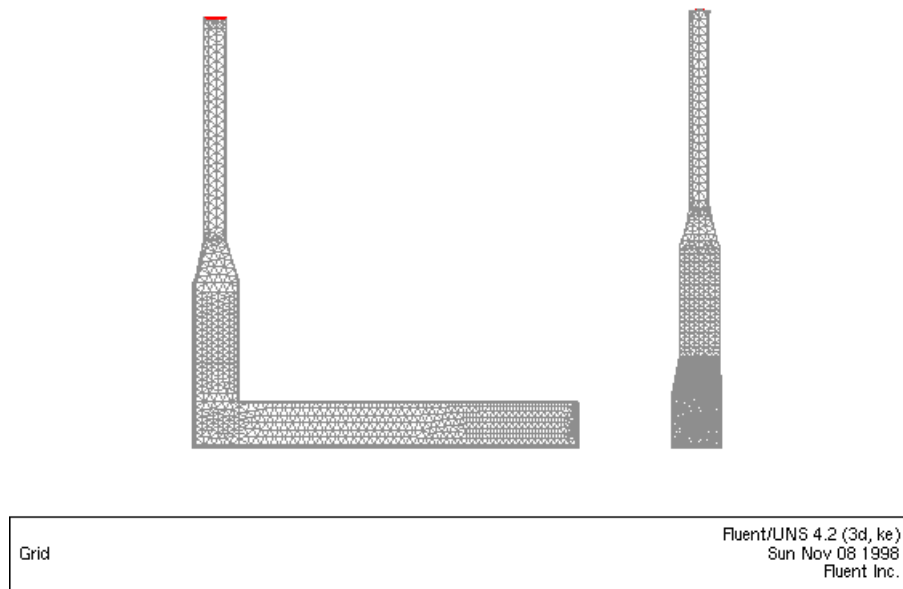


Figura 6.1: Malha de 31 067 células adaptada à geometria da fornalha.

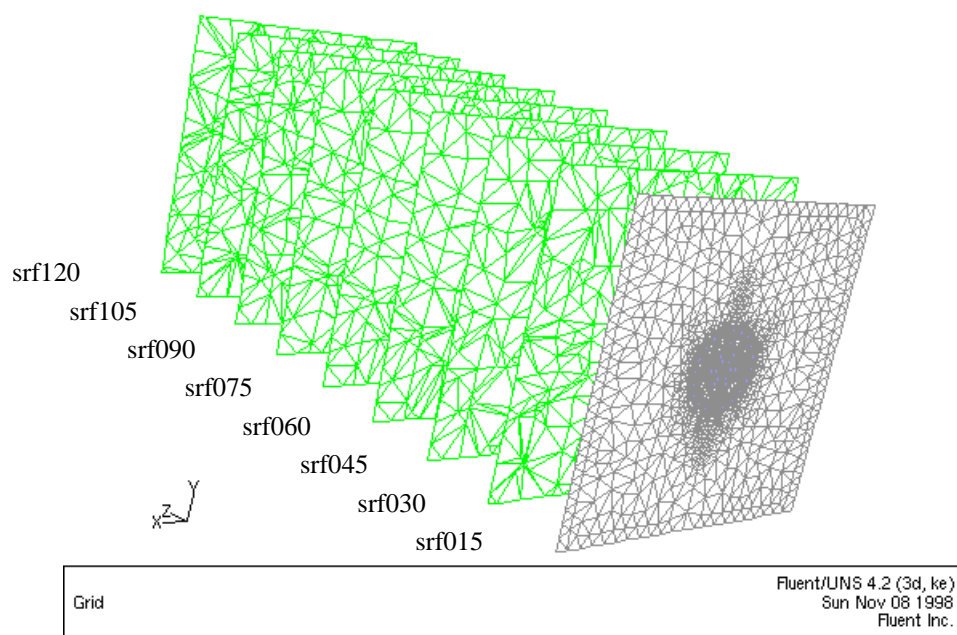


Figura 6.2: Perspectiva da malha computacional em alguns dos planos usados na comparação dos resultados numéricos das simulações.

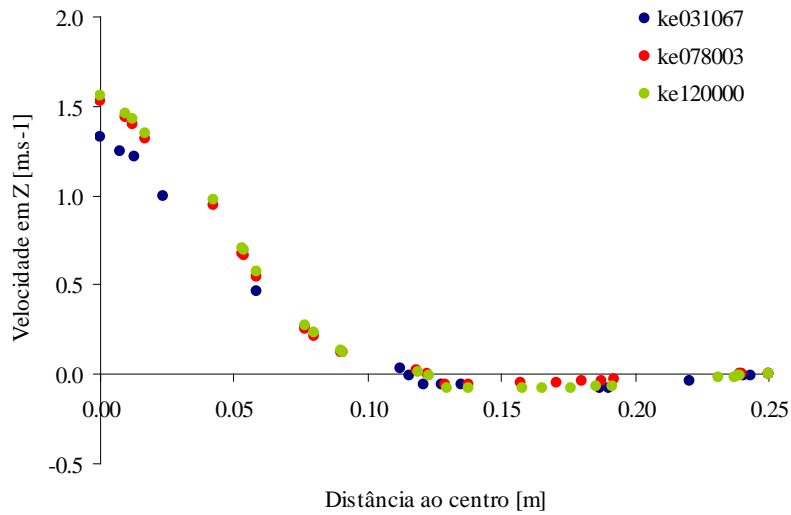


Figura 6.3: Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota *k015*, em função da distância radial ao centro

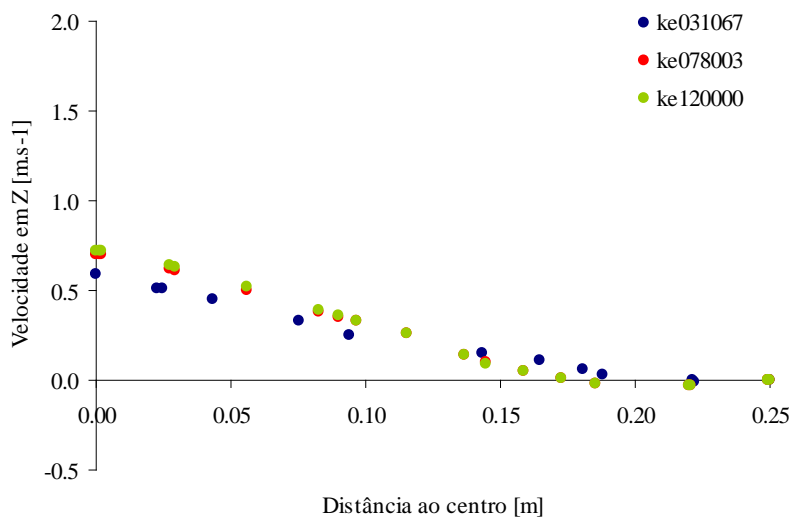


Figura 6.4: Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota *k045*, em função da distância radial ao centro.

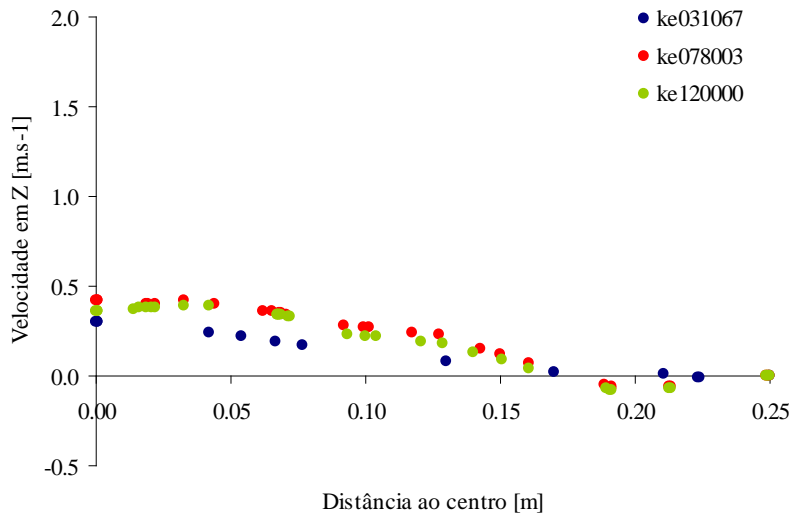


Figura 6.5: Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota  $k075$ , em função da distância radial ao centro.

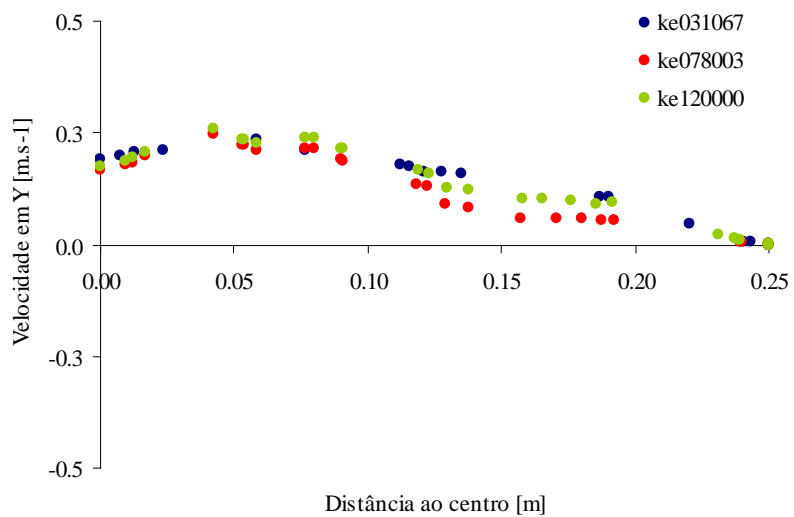
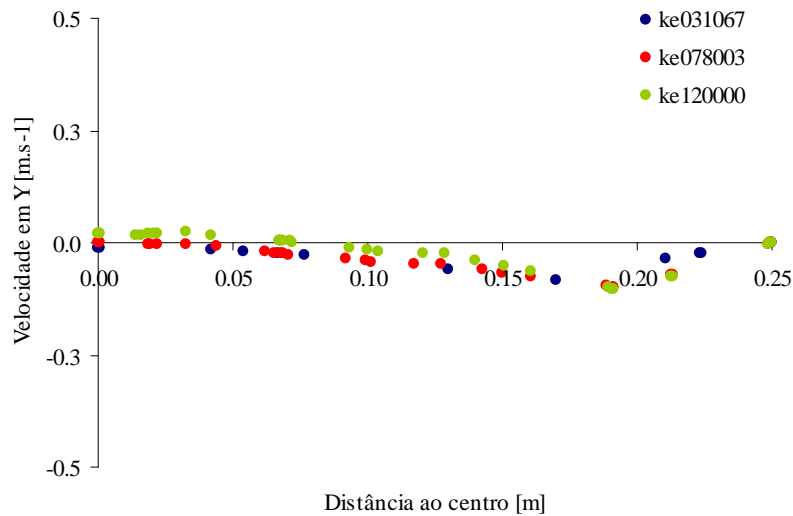


Figura 6.6: Comparação da componente transversal da velocidade, entre as três malhas, na cota  $k015$ , em função da distância radial ao centro.



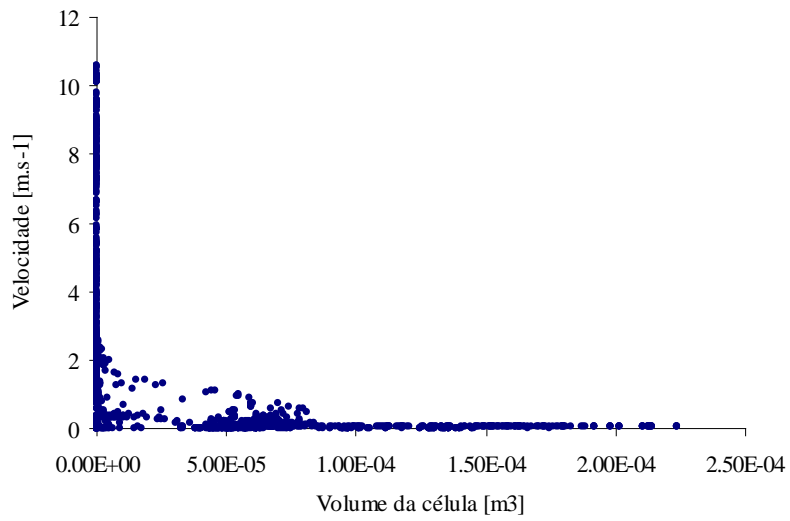
*Figura 6.7:* Comparação da componente longitudinal da velocidade, entre as três malhas, na cota  $k045$ , em função da distância radial ao centro.

Os resultados provenientes dos vários planos são comparados em termos das componentes da velocidade, visto que a variação de pressão é desprezável, segundo cada um dos eixos e, ainda, através da resultante dessas componentes.

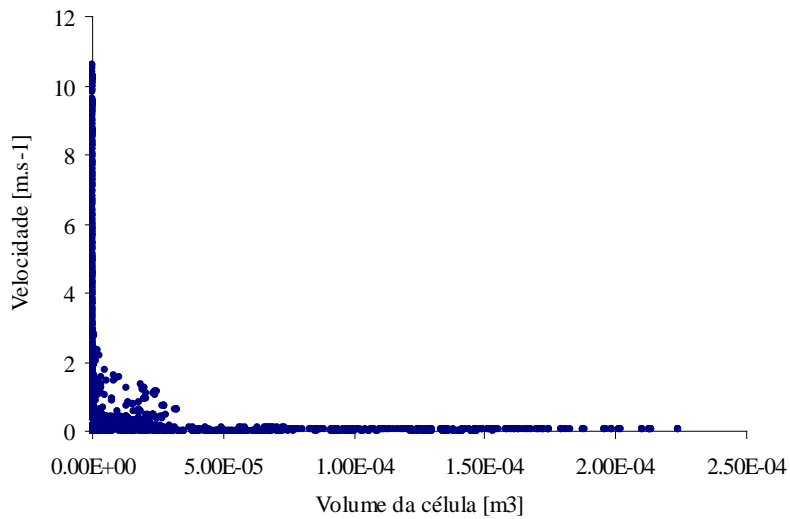
Como se pode observar nas *Figuras 6.3 a 6.5*, os valores resultantes da componente Velocidade em Z são bastante semelhantes para as malhas de 78 003 e 120 000 células, mas com variações significativas para a malha de 31 067 células.

É de notar que o caso de maior divergência entre as malhas de 78 003 e 120 000 é mostrado na *Figura 6.3*, em que se encontram dois pontos com variações ligeiramente abaixo dos 30 %. Em contrapartida mostra-se, nas *Figuras 6.5 e 6.6*, as diferenças mais significativas entre a malha de 31 067 células e as restantes.

Pelas figuras acima mostradas pode-se observar que as diferenças entre as malhas de 78 003 e 120 000 células não são significativas, mas as diferenças destas para a malha de 31 067 células já são bastante significativas, ideia esta que se complementa através das *Figuras 6.8 a 6.10*, que nos mostram a velocidade em cada célula, com o volume da célula em ordenada.



*Figura 6.8:* Velocidade em cada célula, em função do volume da célula, na malha de 31 067 células.



*Figura 6.9:* Velocidade em cada célula, em função do volume da célula, na malha de 78 003 células.

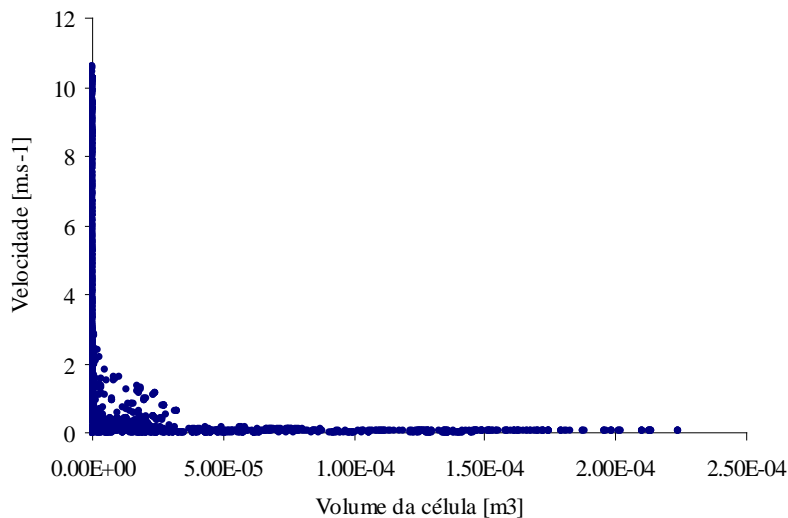


Figura 6.10: Velocidade em cada célula, em função do volume da célula, na malha de 120 000 células.

## 6.2 Escoamento isotérmico

Após a construção da malha de cálculo, os primeiros testes ao funcionamento do modelo numérico foram efectuados considerando um escoamento isotérmico de azoto. Para tal considerou-se uma velocidade do azoto de, respectivamente,  $10,18 \text{ m.s}^{-1}$ ,  $9,49 \text{ m.s}^{-1}$ ,  $10,61 \text{ m.s}^{-1}$  e  $8,64 \text{ m.s}^{-1}$  nas *Inlet1*, *Inlet2*, *Inlet3* e *Inlet4*, com um caudal médio de, aproximadamente,  $380 \text{ l.min}^{-1}$ . Nestas condições foi testada a aplicação dos três modelos de turbulência disponíveis (modelo  $k-\varepsilon$ , modelo *RNG* e modelo *RSM*) por forma a avaliar as diferenças em termos dos perfis do escoamento e dificuldades de convergência numérica inerentes a cada um deles.

Tal como esperado, os resultados produzidos apresentam variações devido às diferenças, significativas, existentes na modelação da turbulência que cada um deles efectua. O escoamento na expansão após as entradas é descrito por cada modelo de forma diferente. Como se pode observar, o isotropismo do modelo  $k-\varepsilon$  produz menores penetrações das componentes transversais horizontal (VX) e vertical (VY), prevendo em média, valores mais baixos para esta variável (Figuras 6.11 a 6.14).

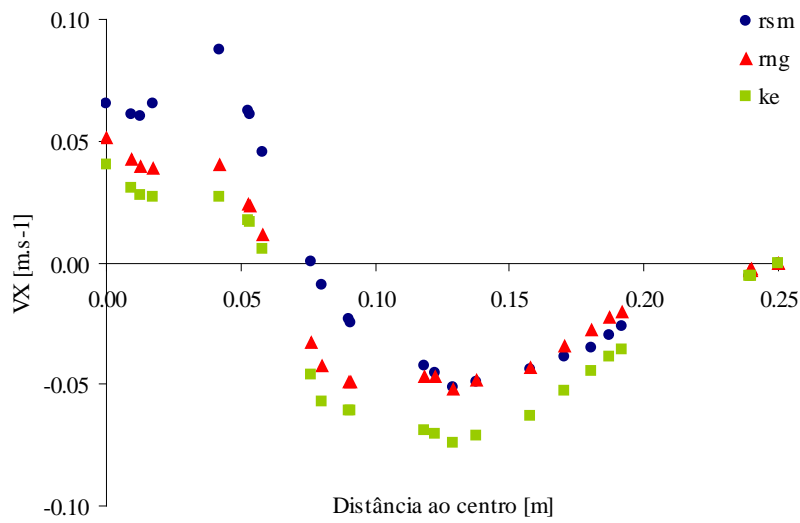


Figura 6.11: Velocidade em X em função da distância radial ao queimador, na cota  $k015$ .

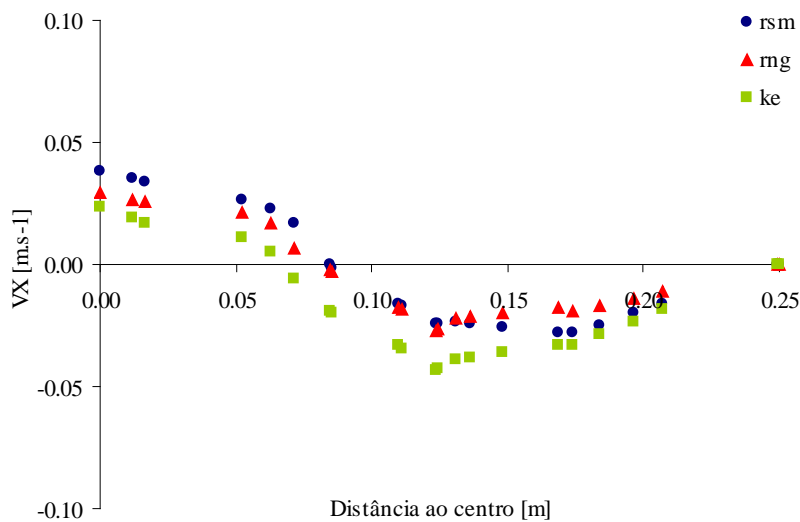


Figura 6.12: Velocidade em X em função da distância radial ao queimador, na cota  $k025$ .

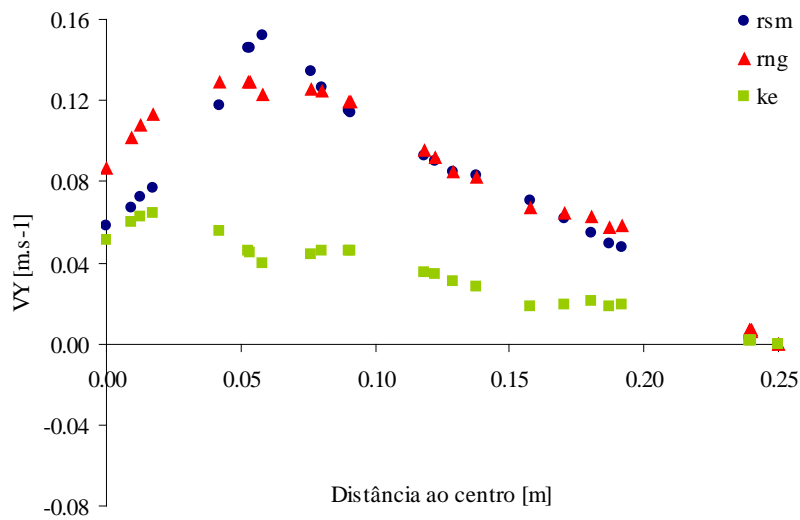


Figura 6.13: Velocidade em Y em função da distância radial ao queimador, na cota  $k015$ .

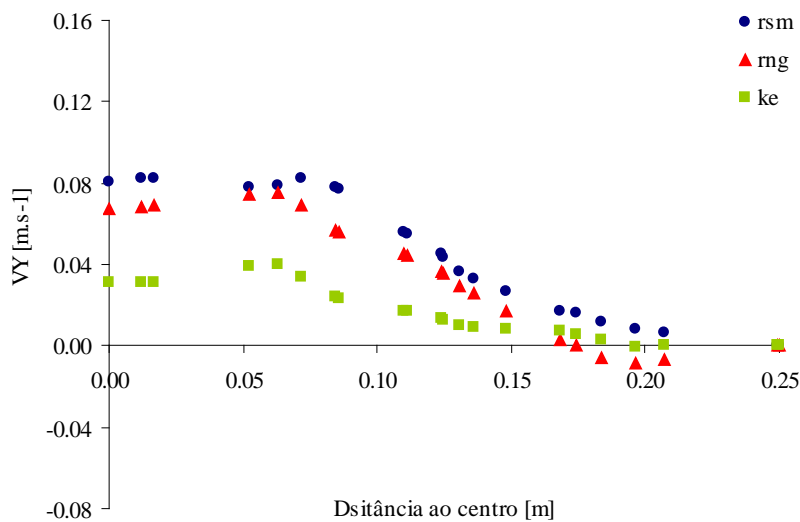


Figura 6.14: Velocidade em Y em função da distância radial ao queimador, na cota  $k025$ .



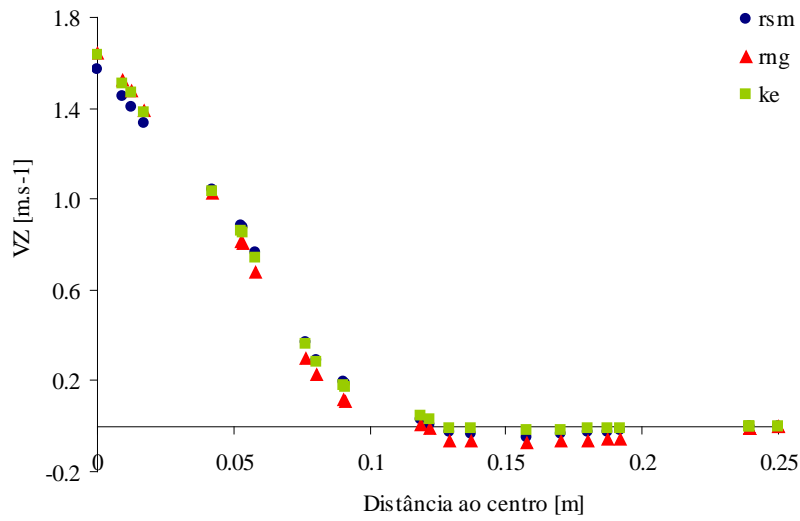


Figura 6.15: Velocidade em Z em função da distância radial ao queimador, na cota  $k015$ .

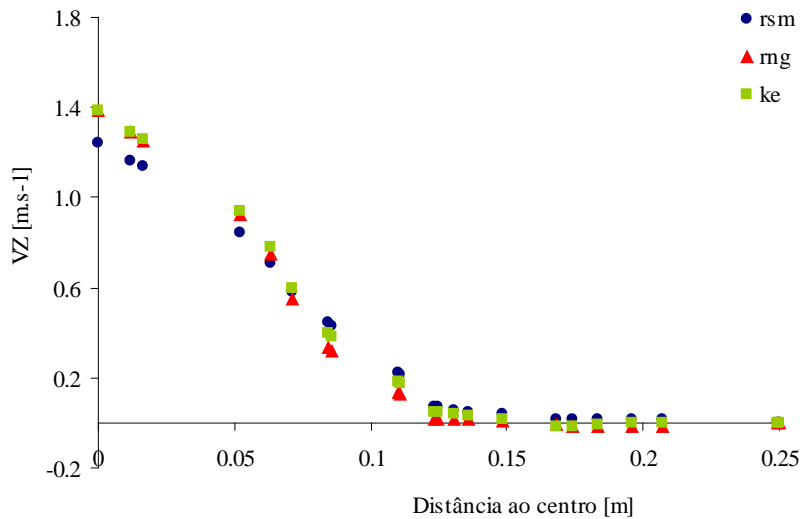
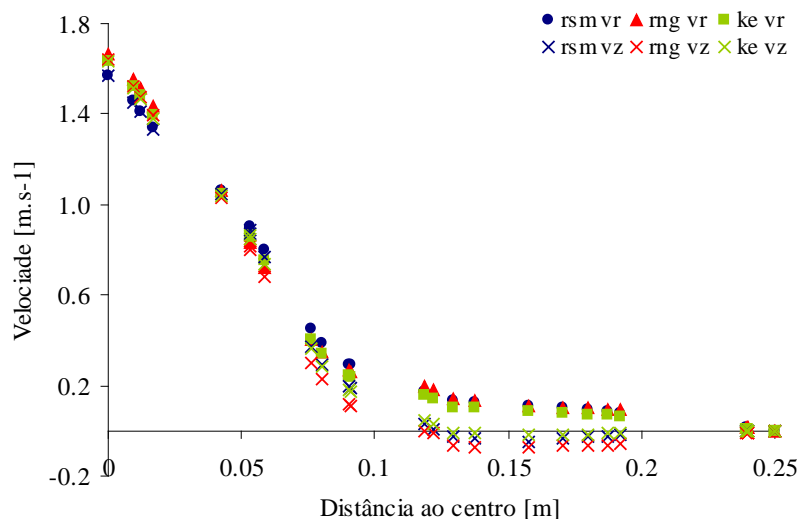


Figura 6.16: Velocidade em Z em função da distância radial ao queimador, na cota  $k025$ .

De qualquer forma, as reduzidas componentes transversais da velocidade, que só têm algum significado no primeiro metro da fornalha, deixam supor que não têm uma grande influência no fluxo global do escoamento dentro da fornalha.

A utilização do modelo *RNG* prevê a existência de mudanças, significativas, de direcção para o escoamento, até na proximidade das paredes da fornalha, principalmente na zona das entradas do escoamento, onde se verifica uma certa inversão da direcção do escoamento, nomeadamente no que respeita à componente longitudinal da velocidade (*VZ*), o que leva à existência de recirculação nas zonas próximas às paredes da fornalha (*Figuras 6.15 e 6.16*).

Exceptuando pequenas regiões da fornalha, a característica previsional comum que resulta da utilização de cada modelo de turbulência é a influência dominante da componente longitudinal na velocidade resultante (*VR*). Os perfis de *VR* são praticamente coincidentes com os perfis da componente *VZ* (*Figuras 6.17 e 6.18*).



*Figura 6.17:* Comparação da Velocidade Resultante com a Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, na cota *k015*.

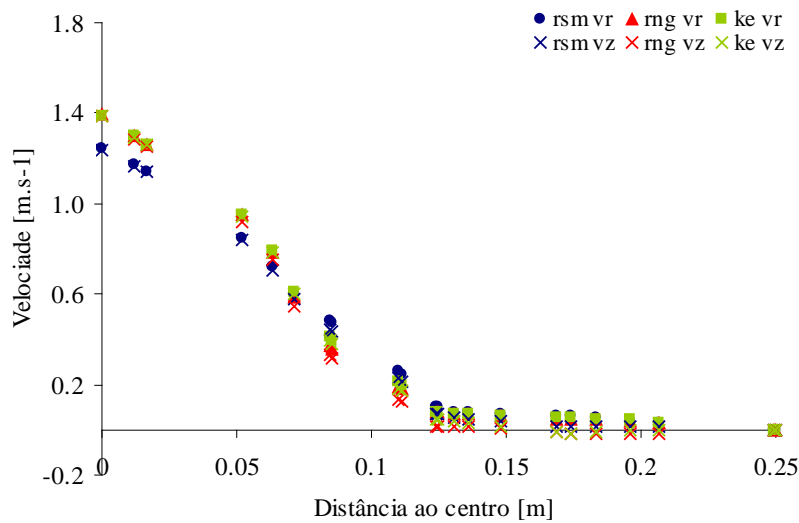


Figura 6.18: Comparação da Velocidade Resultante com a Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, na cota  $k_{025}$ .

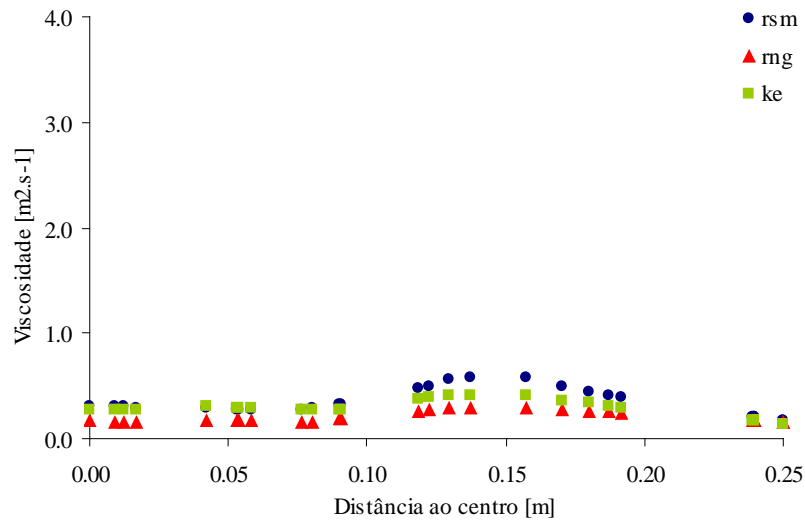
Como se pode observar nas figuras acima, a intensa velocidade do gás na zona central da fornalha conduz a uma tendência para a inversão da direcção do escoamento junto às paredes no primeiro 1/3 da fornalha. Devido a este facto pode-se notar uma menor uniformidade para os modelos *RSM* e *RNG* do que para o modelo  $k-\epsilon$ .

O modelo *RSM* produz perfis de escoamento diferentes dos outros dois modelos, embora, de uma forma geral, se aproxime mais dos valores gerados pelo modelo *RNG*. O perfil longitudinal da velocidade é quase idêntico ao do modelo *RNG*.

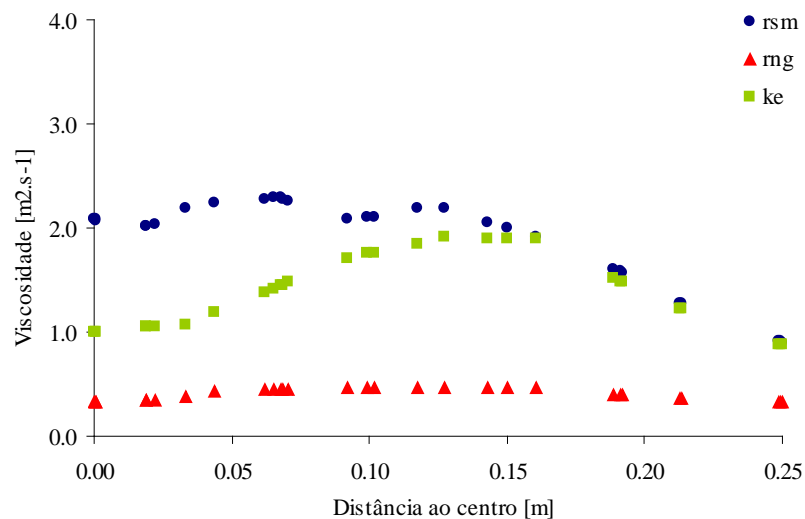
Globalmente, os valores produzidos pelo modelo *RNG* aproximam-se mais dos do modelo *RSM*, do que dos valores do modelo  $k-\epsilon$ .

Verifica-se uma diferença significativa, na viscosidade efectiva do escoamento, em função do modelo de turbulência adoptado, que advém do próprio cálculo da viscosidade efectiva. Visto que  $\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t$ , o factor que implica variação é a viscosidade turbulenta, que para os modelos de duas equações é isotrópica (ou quase no modelo *RNG*) e no caso do modelo *RSM* é anisotrópica, calculada segundo todas as direcções.

Tendo em conta as possíveis diferenças entre eles não se estranha a existência de variações nos valores de viscosidade efectiva encontrados (*Figuras 6.19 e 6.20*).



*Figura 6.19:* Viscosidade, em função da distância radial ao queimador, na cota *k015*.



*Figura 6.20:* Viscosidade, em função da distância radial ao queimador, na cota *k075*.

Em face dos recursos computacionais existentes, a análise comparativa da aplicação dos modelos de turbulência não se esgota nas diferenças dos resultados produzidos. Dado que o esquema de cálculo assenta num processo iterativo, o número médio de iterações necessárias para alcançar a convergência numérica, definida através de um critério de paragem, assim como o tempo computacional envolvido em cada iteração, são parâmetros a ter em conta na avaliação dos modelos.

Em média, são necessárias 250 a 300 iterações para se obter a convergência numérica de um caso com a aplicação do modelo  $k-\varepsilon$ . Este valor aumenta para 350 a 400 iterações quando o modelo *RNG* está activo, e é necessário realizar 500 a 600 iterações para utilizar o modelo *RSM*.

Estes valores indicam uma nítida vantagem na utilização do modelo  $k-\varepsilon$ , relativamente aos restantes, no entanto, é, ainda, necessário contabilizar as diferenças em termos de tempo efectivo.

Considerando que cada iteração com o modelo  $k-\varepsilon$  demora, em termos médios, 35 segundos, são necessárias cerca de 2,7 horas de cálculo para atingir a convergência. A utilização do modelo *RNG* faz subir este valor para 4,7 horas e o modelo *RSM* para 9,9 horas. O tempo total de cálculo é, portanto, incomparavelmente mais elevado quando é utilizado o modelo *RSM*. Isto deriva do facto de não só ser necessário executar mais iterações, como, também, cada iteração demorar mais 86 %, relativamente ao tempo necessário para calcular uma iteração com o modelo  $k-\varepsilon$ .

Os valores apresentados inviabilizam a utilização generalizada do modelo *RSM*, comprometendo, igualmente, a aplicação do modelo *RNG*. Desta forma, e atendendo às diferenças apontadas anteriormente, o modelo de turbulência a utilizar preferencialmente será o modelo  $k-\varepsilon$ .

**Quadro 6.1:** Comparação do esforço computacional médio para a resolução numérica de um escoamento turbulento em condições isotérmicas.

<i>Modelo de turbulência</i>	<i>Número médio de iterações</i>	<i>Tempo médio por iteração [s]</i>	<i>Tempo relativo</i>	<i>Tempo computacional total [h]</i>
<i>k-ε</i>	275	35	1,00	2,67
<i>RNG</i>	375	45	1,29	4,69
<i>RSM</i>	550	65	1,86	9,93

### 6.3 Escoamento adiabático

A existência de combustão no interior da fornalha altera a forma dos perfis internos do escoamento. O fluxo de energia junto às paredes, proveniente da queima de combustível altera profundamente as propriedades médias do fluido. A grande variação na massa específica dos gases, por aumento de temperatura é a principal responsável pelas elevadas velocidades em condições de combustão. Os padrões de funcionamento de uma fornalha nestas situações são, necessariamente, diferentes dos correspondentes em situações isotérmicas. É sobretudo nestas situações que a correcta selecção do modelo de turbulência mais se faz sentir. É de prever que a menor penetração das componentes transversais da velocidade, resultante da aplicação do modelo *k-ε*, conduza a uma combustão mais localizada, à existência de temperaturas locais mais elevadas e a uma menor eficiência da mistura das espécies químicas.

Embora se verifiquem alguns desvios nos perfis de velocidade (*Figura 6.21*), a utilização de qualquer um dos modelos de turbulência não produz variações significativas em termos das concentrações das espécies, praticamente em todo o corpo da fornalha. Apenas na cota *k015* se encontraram algumas diferenças na utilização dos diferentes modelos de turbulência (*Figura 6.22*), de tal forma que a composição do gás na chaminé é idêntica para os três modelos de turbulência (*Quadro 6.2*).

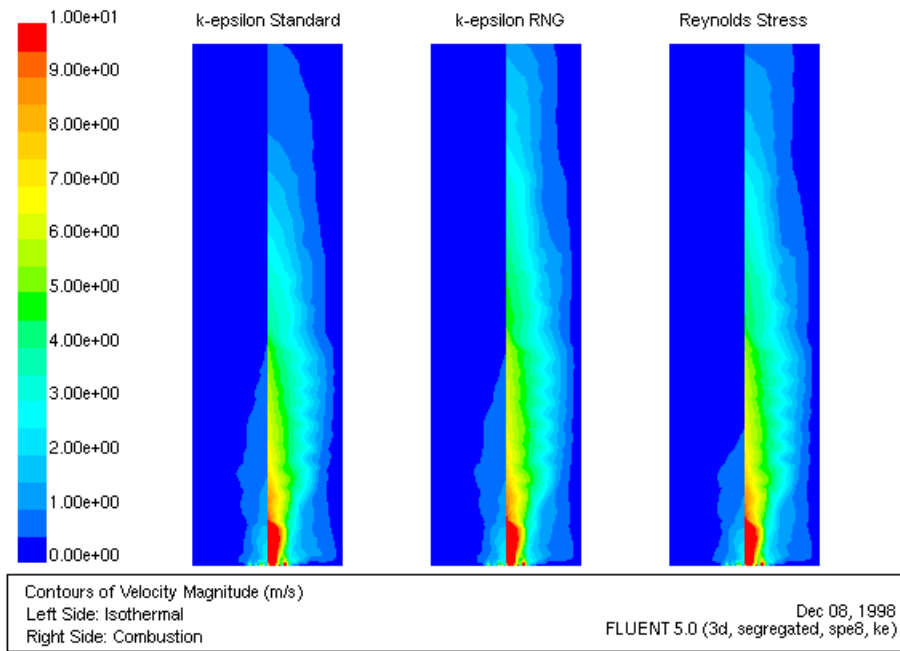


Figura 6.21: Contornos de velocidade (VR) em escoamento isotérmico e em escoamento com combustão, para cada modelo de turbulência.

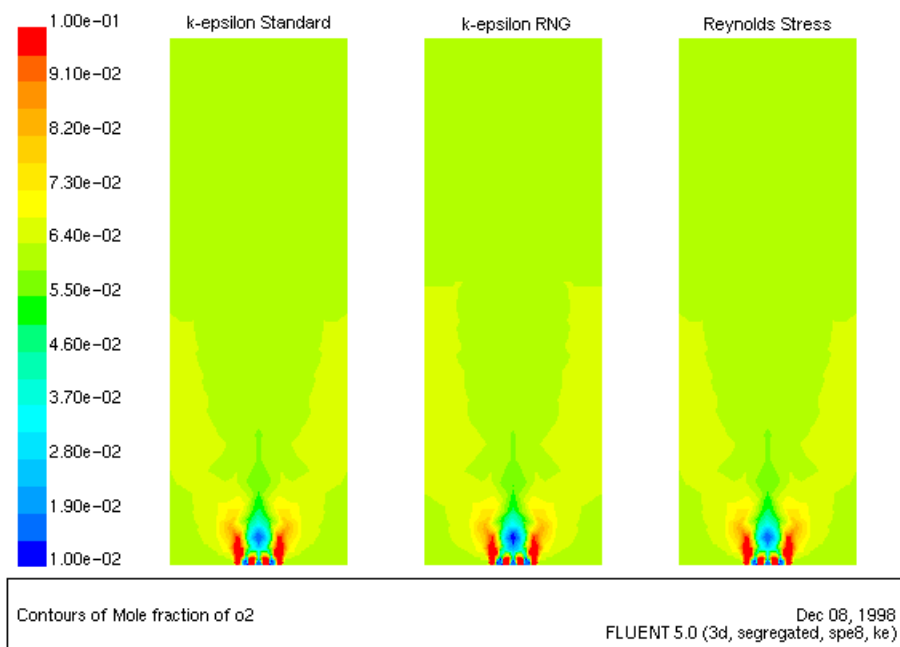
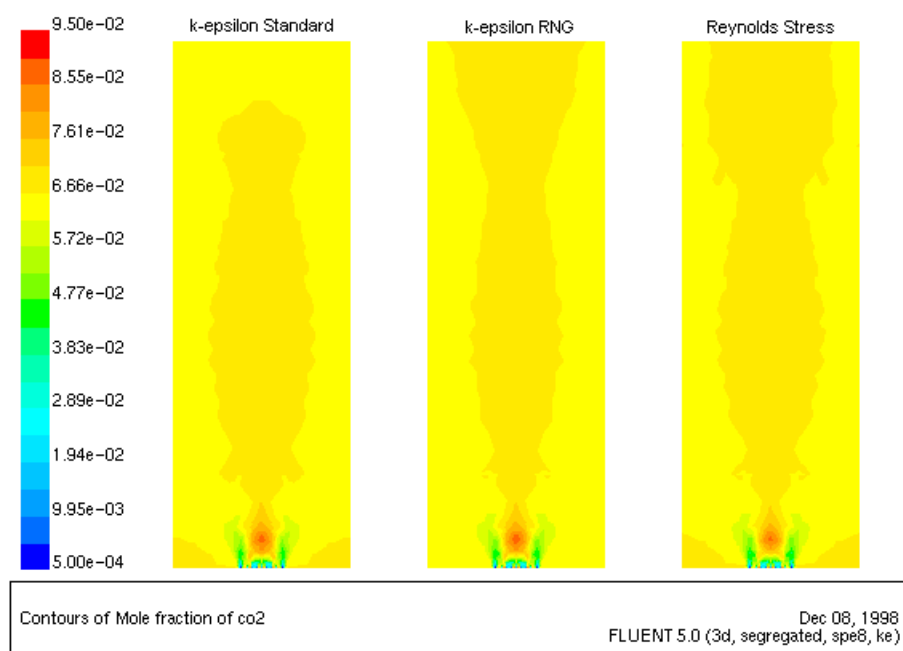


Figura 6.22: Perfil da fracção molar da espécie  $O_2$  no escoamento adiabático.



*Figura 6.23:* Perfil da fracção molar da espécie  $\text{CO}_2$  no escoamento adiabático.

*Quadro 6.2:* Fracção molar (%) das espécies químicas na chaminé da fornalha para cada modelo de turbulência, com escoamento adiabático.

<i>Espécie química</i>	<i>Modelo de turbulência</i>		
	<i>k-ε</i>	<i>RNG</i>	<i>RSM</i>
$\text{CH}_4$	0,00	0,00	0,00
$\text{O}_2$	4,26	4,05	4,04
$\text{CO}$	0,00	0,00	0,00
$\text{CO}_2$	7,66	7,71	7,71
$\text{H}_2\text{O}$	15,07	15,21	15,21
$\text{N}_2$	73,01	73,04	73,04

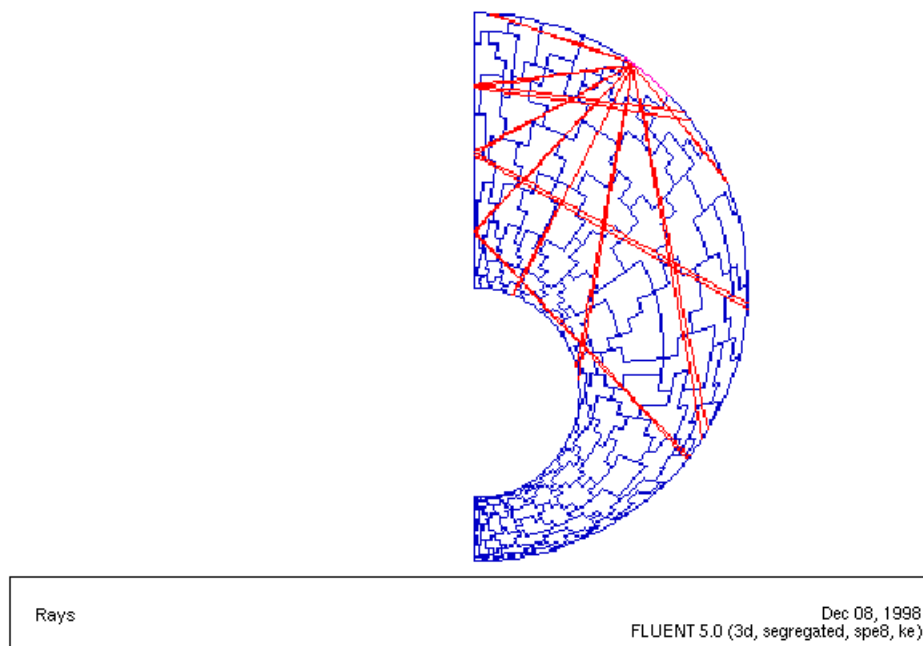
### 6.3.1 Radiação

Como a distribuição da energia no interior da fornalha é feita, maioritariamente, por radiação, revela-se de significativa importância o estudo dos diferentes modelos de radiação disponíveis. Em condições adiabáticas, a combustão segundo o *Modelo 1*



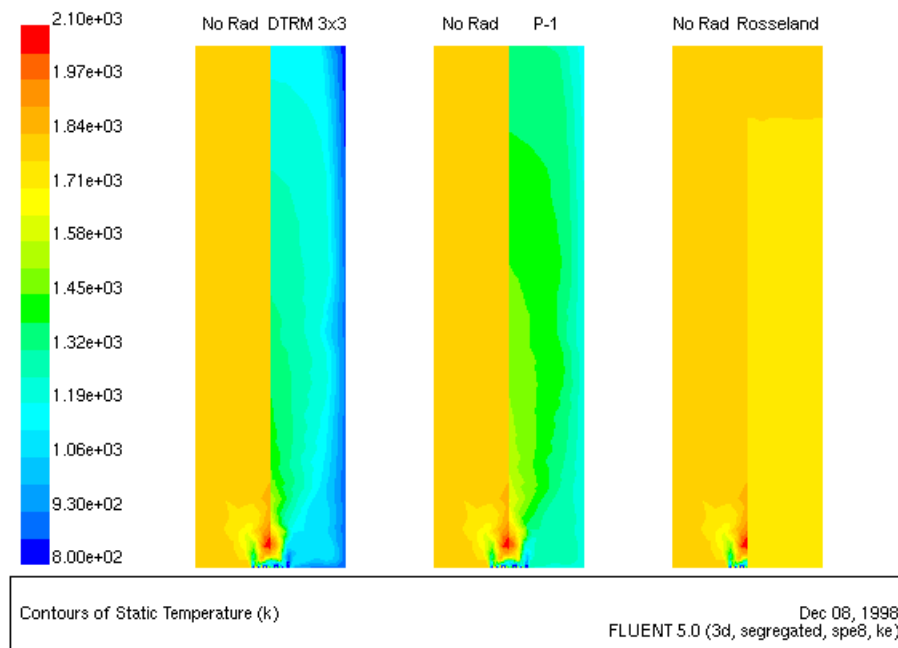
gera temperaturas locais máximas de aproximadamente 1900 K, na ausência de radiação, e, ao se considerar as transferências internas de calor por radiação, os valores máximos de temperatura variam entre cerca de 1500 e 1800 K.

Os resultados produzidos pelo modelo *DTRM* estão intimamente relacionados com o número de direcções discretas de radiação (número de raios segundo  $\phi$  e  $\theta$ ) e com a malha computacional. Assumindo o valor *default* de 0,6 para a emissividade interna das paredes da fornalha, encontra-se uma diminuição da temperatura dos gases na saída da fornalha proveniente da activação do modelo de radiação. Esta redução está relacionada com o rigor com que o modelo prevê a distribuição da energia radiante, que, por sua vez, está dependente de uma escolha acertada do número de direcções de radiação (*Figura 6.24*).



*Figura 6.24:* Discretização da energia radiante (em geometria circular para melhor visualização).

Teoricamente deve-se proceder à escolha do número de raios da mesma forma que se procedeu à escolha da malha, ou seja, incrementando esse número até que as variações não sejam significativas de um determinado número de raios para a situação seguinte, todavia torna-se difícil utilizar, em cada nó da malha, mais de 16 raios devido ao enorme esforço computacional imposto.



*Figura 6.25: Iso-linhas de temperatura em escoamento adiabático com e sem os vários modelos de radiação.*

O modelo *DTRM* e o modelo *P-1* chegam a valores bastante diferentes dos do modelo de *Rosseland*, principalmente por não ser o modelo mais apropriado para o percurso óptico em causa. Os modelos *DTRM* e *Rosseland* têm um custo computacional semelhante, enquanto que o modelo *P-1* tem um custo computacional muito elevado em face dos recursos disponíveis, ou seja, acrescenta mais uma equação para ser resolvida em contínuo pelo código e demora mais tempo por iteração, o que implica uma demora acentuada na resolução de um caso adiabático. O modelo de *Rosseland* tem um problema quando é utilizado em casos de combustão com percursos ópticos tão baixos. Esse problema revela-se nos resultados apresentados, visto que, por ser um método estatístico, a radiação é calculada com base na equação da energia e os resultados apresentados surgem como valores médios no interior da câmara de combustão (*Figuras 6.25 e 6.27*). Mais uma vez, o método de *Rosseand* não é o indicado para percursos ópticos tão baixos.

Pelos motivos acima apresentados verifica-se que o modelo *DTRM* se encontra mais adaptado à geometria em causa, ainda mais considerando os meios computacionais disponíveis.

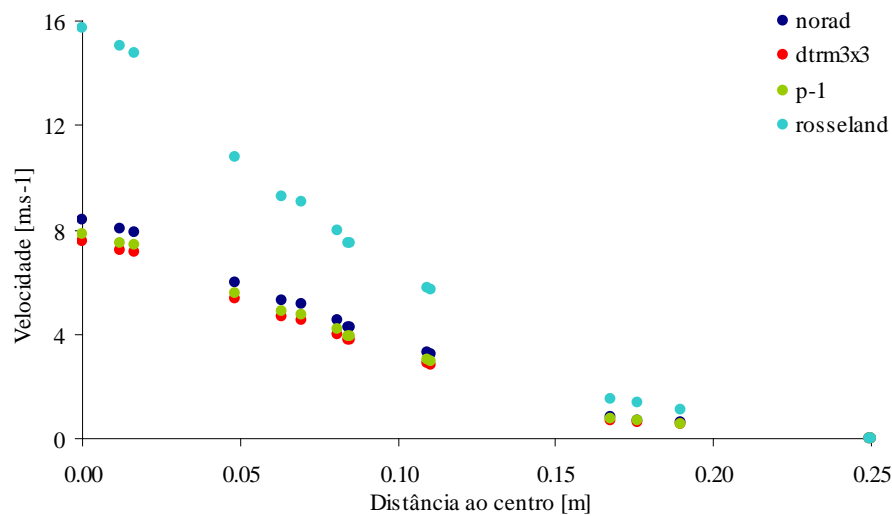


Figura 6.26: Velocidade resultante dos diversos modelos de radiação, na cota *k025*, em função da distância radial ao centro.

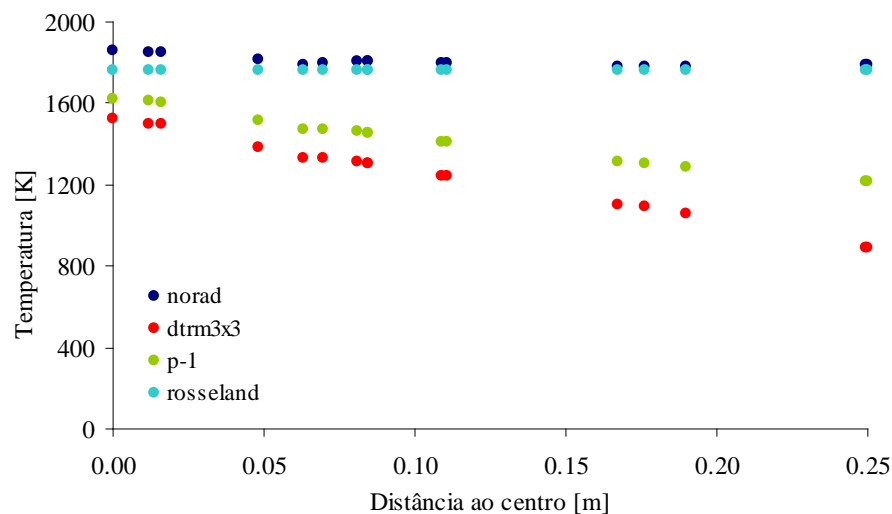
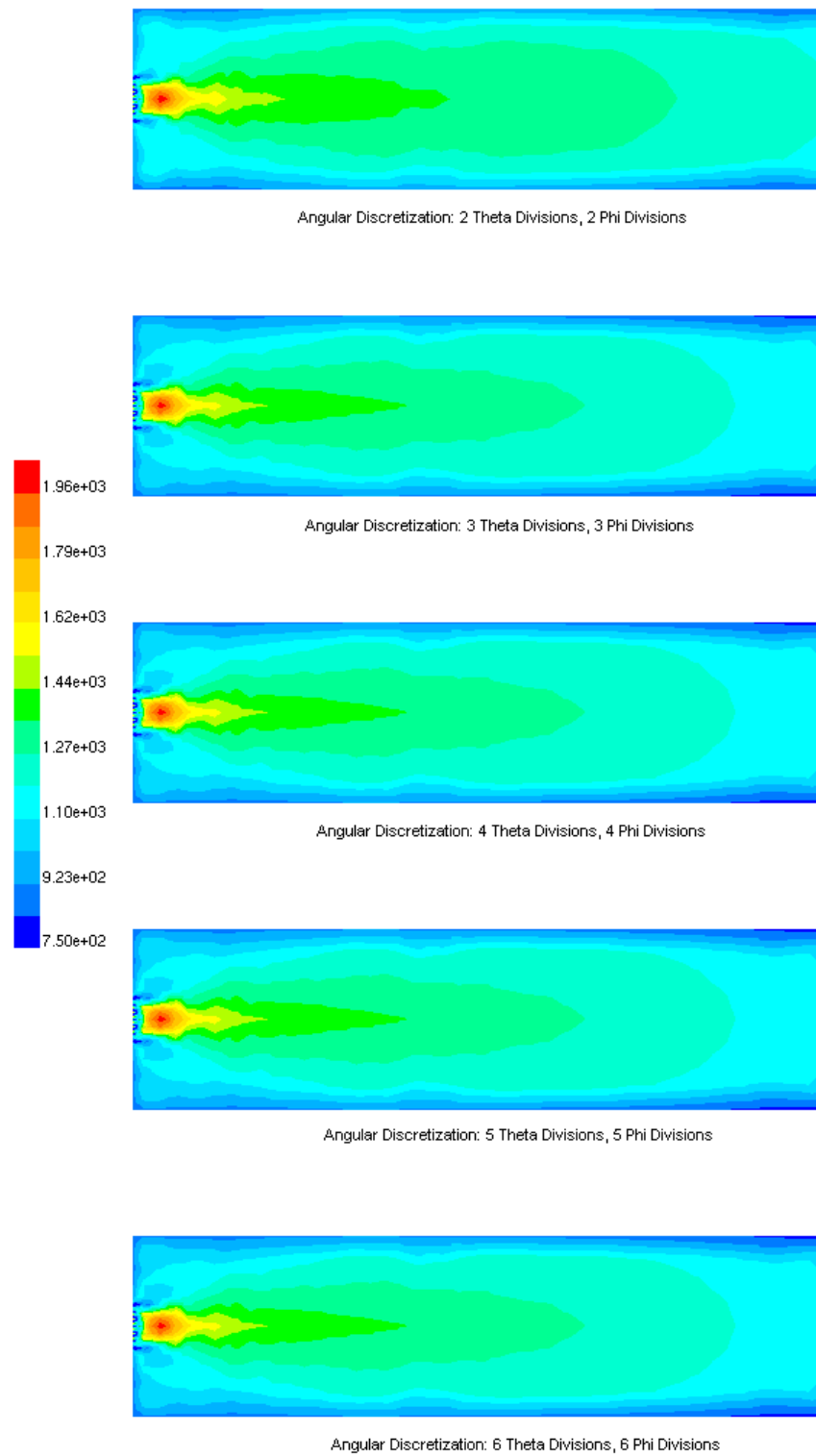


Figura 6.27: Temperatura resultante dos diversos modelos de radiação, na cota *k025*, em função da distância radial ao centro.

### 6.3.1.1 Discretização da energia radiante

Este ponto pode-se revelar de significativa relevância para o cálculo dos perfis de temperatura no interior da câmara de combustão, visto que a energia libertada pela combustão se encontra numa zona muito restrita, extremamente próxima do queimador, zona onde se encontram o combustível, o comburente e a energia necessária para se dar início à reacção entre os dois.



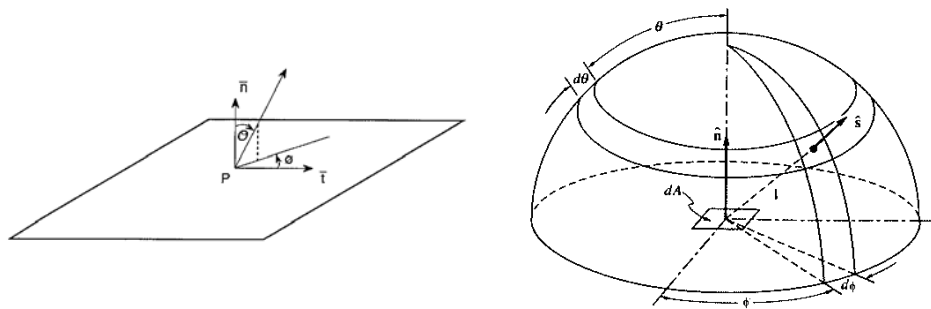
Contours of Static Temperature (k)

Dec 07, 1998  
FLUENT 5.0 (3d, segregated, spe8, ke)

Figura 6.28: Iso-linhas de temperatura com utilização de diferente número de raios no modelo *DTRM*.

O fenómeno de radiação vai permitir que a energia libertada durante a combustão seja transmitida pela câmara, não ficando, portanto, confinada à zona de reacção.

A forma como a radiação é transmitida, segundo o modelo *DTRM*, implica uma discretização da mesma num determinado número de direcções, embora na realidade essa distribuição seja contínua, ou seja, uma certa superfície vai emitir radiação e, neste modelo, pretende-se dividir essa energia radiante por um determinado número de raios segundo  $\phi$  de 0 a  $2\pi$  e  $\theta$  de 0 a  $\pi/2$ , coordenadas cilíndricas que permitem definir um ângulo no hemisfério sólido. Assim sendo, foram testadas diferentes possibilidades de direcções discretas de radiação, embora sempre com o mesmo número de raios segundo ambas as componentes, com 2, 3, 4, 5 e 6 raios em cada direcção (*Figura 6.28*).



*Figuras 6.29 e 6.30: Ângulos  $\theta$  e  $\phi$  a definir o ângulo sólido hemisférico do Ponto P, bem como a direcção da emissão e o seu ângulo sólido, respectivamente.*

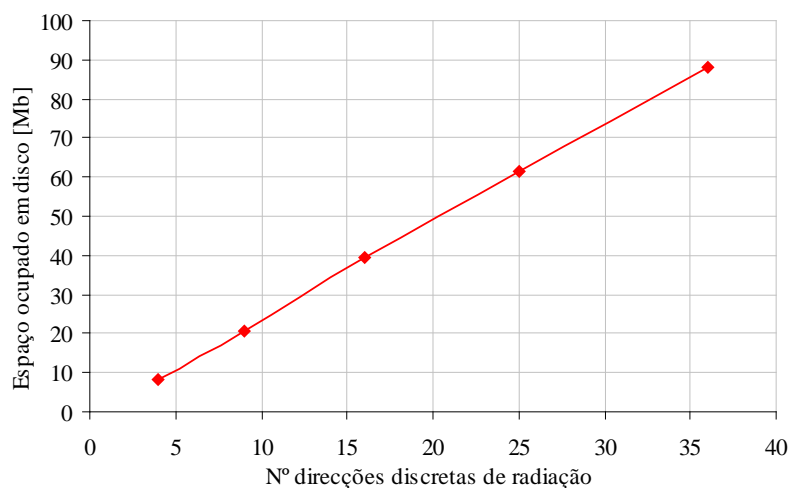
A utilização do modelo *DTRM* não se pode considerar como sendo bastante melhor que a do modelo P-1 de radiação, embora o seja para esta geometria, no que respeita ao esforço computacional. A diferença encontra-se a outro nível, ou seja, enquanto o modelo P-1 implica a resolução de uma equação extra apenas para o cálculo da radiação, o modelo *DTRM* não utilizando mais nenhuma equação necessita de um ficheiro (ficheiro.ray) com a definição (coordenadas) de todos os raios em cada célula do domínio computacional, por forma a possibilitar o cálculo discreto de radiação.

Os ficheiros de raios ocupam, tipicamente bastante espaço, como se mostra no *Quadro 6.3*. Observando a *Figura 6.31*, verifica-se que o espaço ocupado por estes ficheiros de raios depende directamente do número de células do domínio

computacional e do número de direcções discretas utilizadas e a sua variação é linear com o número de raios.

*Quadro 6.3:* Espaço ocupado em disco pelos ficheiros de raios utilizados no estudo de discretização da energia radiante.

<i>Nº raios</i>	<i>Espaço ocupado em disco [Mb]</i>
2x2	8,149
3x3	20,615
4x4	39,384
5x5	61,252
6x6	88,196



*Figura 6.31:* Espaço ocupado pelos ficheiros de raios em função do número de direcções discretas de radiação.

Pode-se encontrar algumas diferenças nas temperaturas máximas atingidas no interior da câmara de combustão, bem como na temperatura média, através de ponderação mássica, à saída da chaminé. Embora as diferenças existam (*Quadro 6.4*), surgem devido à orientação dos raios, visto que a geometria da fornalha utilizada não permite que todas as superfícies radiantes se “vejam” umas às outras, daí que possa haver alguma diferença nas temperaturas à saída, o que já não acontece com a temperatura máxima dentro da câmara de combustão que acaba por radiar praticamente a mesma

energia em qualquer um dos casos, daí que o valor das temperaturas máximas, praticamente, não varie (*Quadro 6.4*).

*Quadro 6.4:* Temperaturas máximas e de saída dos gases com os diferentes números de raios utilizados.

$N^{\circ}$ raios	$T_{Max} [K]$	$T_{Outlet} [K]$
2x2	2038,307	672,6135
3x3	2033,02	652,2895
4x4	2040,456	706,7742
5x5	2032,647	649,0017
6x6	2029,534	636,9835

Apesar das ligeiras variações de temperatura, a utilização de diferentes números de direcções discretas conduz a ligeiras variações da composição elementar dos gases de combustão, de tal forma que foi considerado que a mesma não varia em função do número de raios, como se mostra no *Quadro 6.5*.

*Quadro 6.5:* Composição média dos gases na chaminé.

$N^{\circ}$ raios	$CH_4$	$CO_2$	$H_2O$	$O_2$	$N_2$
2x2	0,0000%	6,6614%	13,1464%	6,3376%	73,8546%
3x3	0,0000%	6,6608%	13,1455%	6,3389%	73,8548%
4x4	0,0000%	6,6612%	13,1462%	6,3379%	73,8547%
5x5	0,0000%	6,6609%	13,1456%	6,3386%	73,8549%
6x6	0,0000%	6,6613%	13,1462%	6,3379%	73,8546%

Para além da composição elementar dos gases de combustão na chaminé, foi realizado, também, um estudo da variação das fracções molares das várias espécies químicas intervenientes em todo o processo em função do número de direcções discretas utilizado, de onde se pode salientar que o número de raios utilizado não influencia a presença ou distribuição das espécies na câmara de combustão, como se pode ver pelas *Figuras 6.32 e 6.33*.

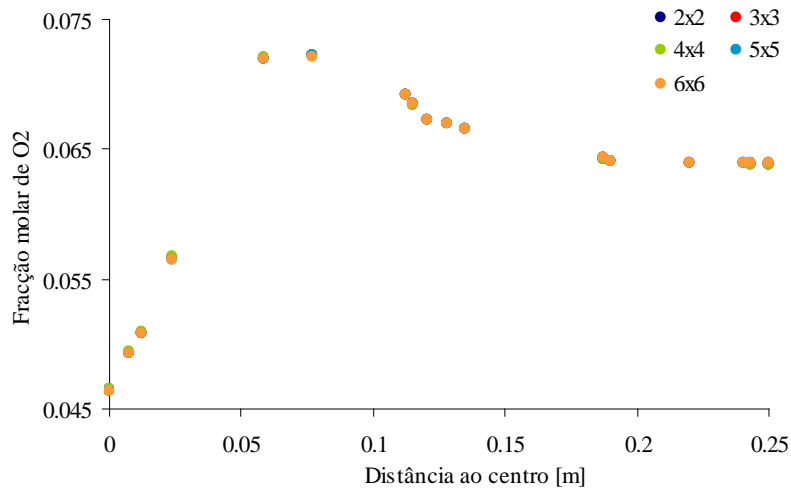


Figura 6.32: Fração molar do oxigénio na cota  $k015$ , em função da distância radial ao queimador.

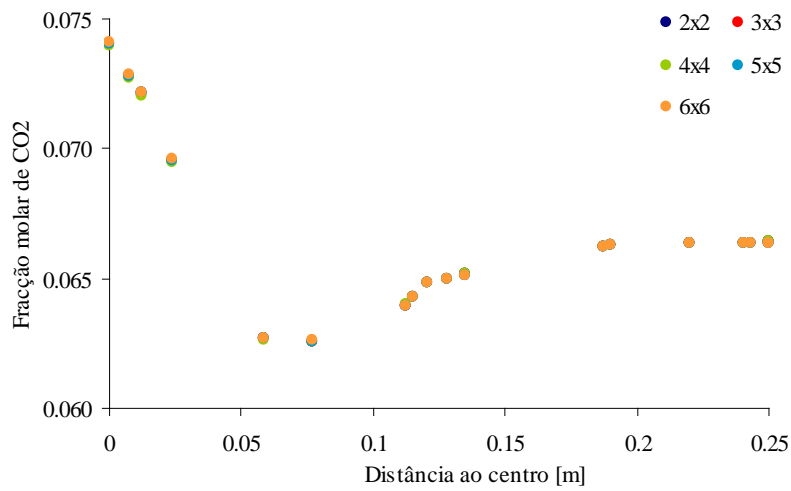


Figura 6.33: Fração molar do dióxido de carbono na cota  $k015$ , em função da distância radial ao queimador.

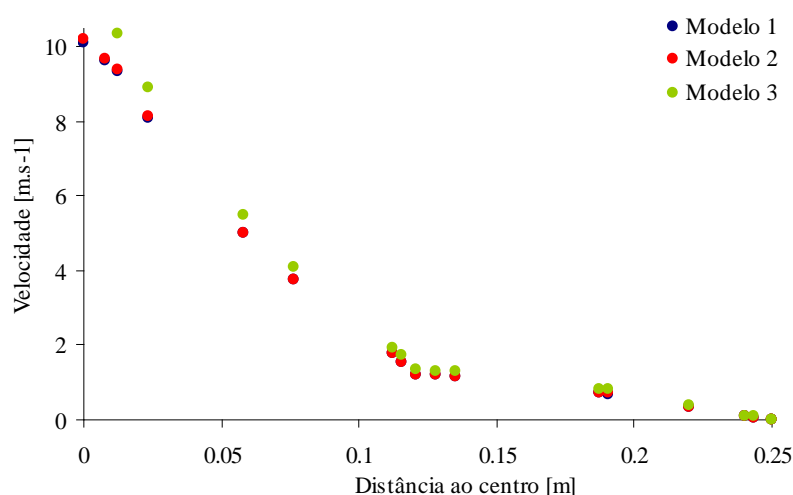


## 6.4 Escoamento reactivo

Este ponto é um dos mais importantes na definição dos parâmetros a utilizar para a modelação dos processos de combustão no interior da fornalha.

Como mencionado no *Capítulo II*, foram considerados três mecanismos de combustão através da utilização de outros tantos modelos cinéticos, para definir o escoamento reactivo no interior da fornalha, o *Modelo 1 - Mecanismo de passo único*, apenas com uma reacção que produz dióxido de carbono e água, directamente, a partir do metano, o *Modelo 2 - Mecanismo de duplo passo*, que continua a utilizar, apenas, o metano como combustível mas já inclui duas reacções, a primeira onde se produz monóxido de carbono e água e uma segunda onde se produz o  $\text{CO}_2$ , e ,finalmente, o *Modelo 3 - Mecanismo de duplo passo multi-percursor*, que já prevê a utilização do etano e do propano como combustíveis, visto que, também, fazem parte integrante da composição do gás natural.

As principais diferenças na utilização dos diferentes modelos cinéticos mencionados revelam-se ao nível da distribuição da temperatura e das espécies químicas. É de notar que as variações de temperatura influenciam a velocidade do escoamento. Algumas variações destes parâmetros podem ser observados nas *Figuras 6.34 a 6.38*.



*Figura 6.34:* Velocidade resultante na fornalha, na cota *k015*, em função da distância radial ao centro.

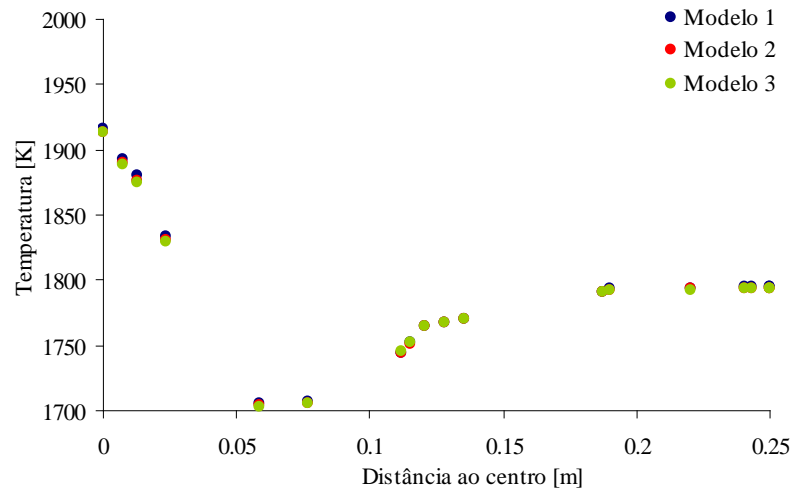


Figura 6.35: Temperatura na fornalha, na cota *k015*, em função da distância radial ao centro.

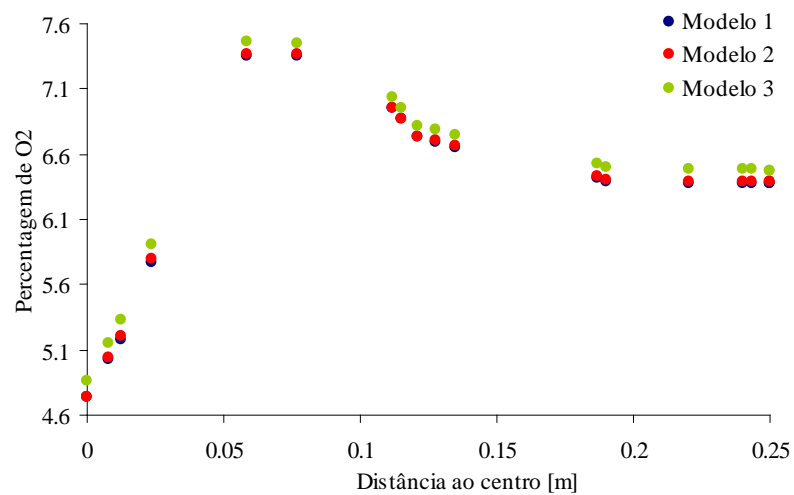
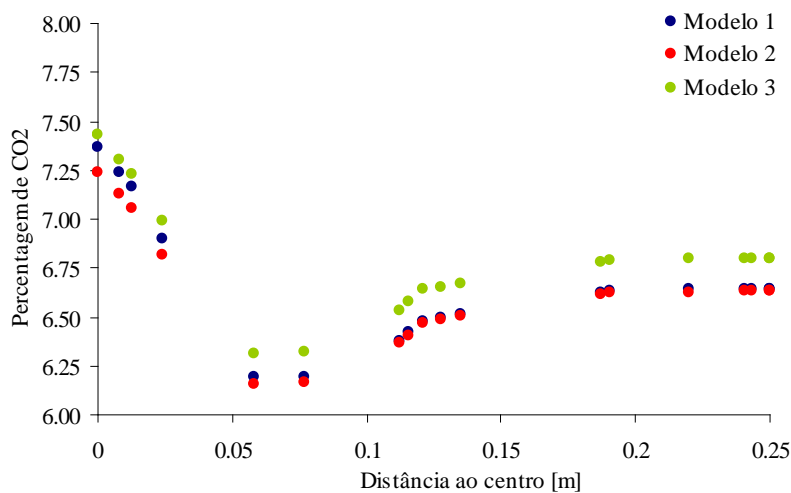


Figura 6.36: Percentagem de oxigénio na fornalha, na cota *k015*, em função da distância radial ao centro.

Como se pode observar das *Figuras 6.34 e 6.35*, a temperatura no interior da câmara de combustão não apresenta variações superiores a 10 °C, mas os perfis de velocidade do escoamento já apresentam divergências, principalmente, para o *Modelo 3*, no início da fornalha, o que, também, se deve às diferenças existentes nas propriedades das espécies constituintes da mistura, como a difusividade mássica, a viscosidade e, até, a massa molecular, visto que o *Modelo 3* já contempla a existência de etano e propano.

As diferenças verificadas no teor de oxigénio na fornalha (*Figura 6.36*), devem-se à variação do caudal de ar à entrada da fornalha, para conseguir atingir um excesso de ar semelhante em todos os modelos, tendo em conta que a estequiometria para as reacções de etano e propano é, necessariamente, diferente da estequiometria da reacção do metano, o que levou a um maior caudal de ar e, de certa forma, justifica a não variação da temperatura, visto que o excesso de ar se mantém.



*Figura 6.37:* Percentagem de dióxido de carbono na fornalha, na cota *k015*, em função da distância radial ao centro.

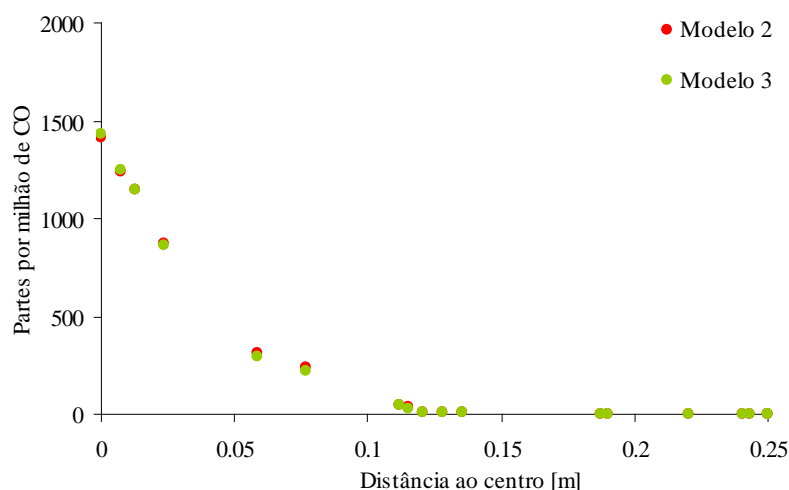
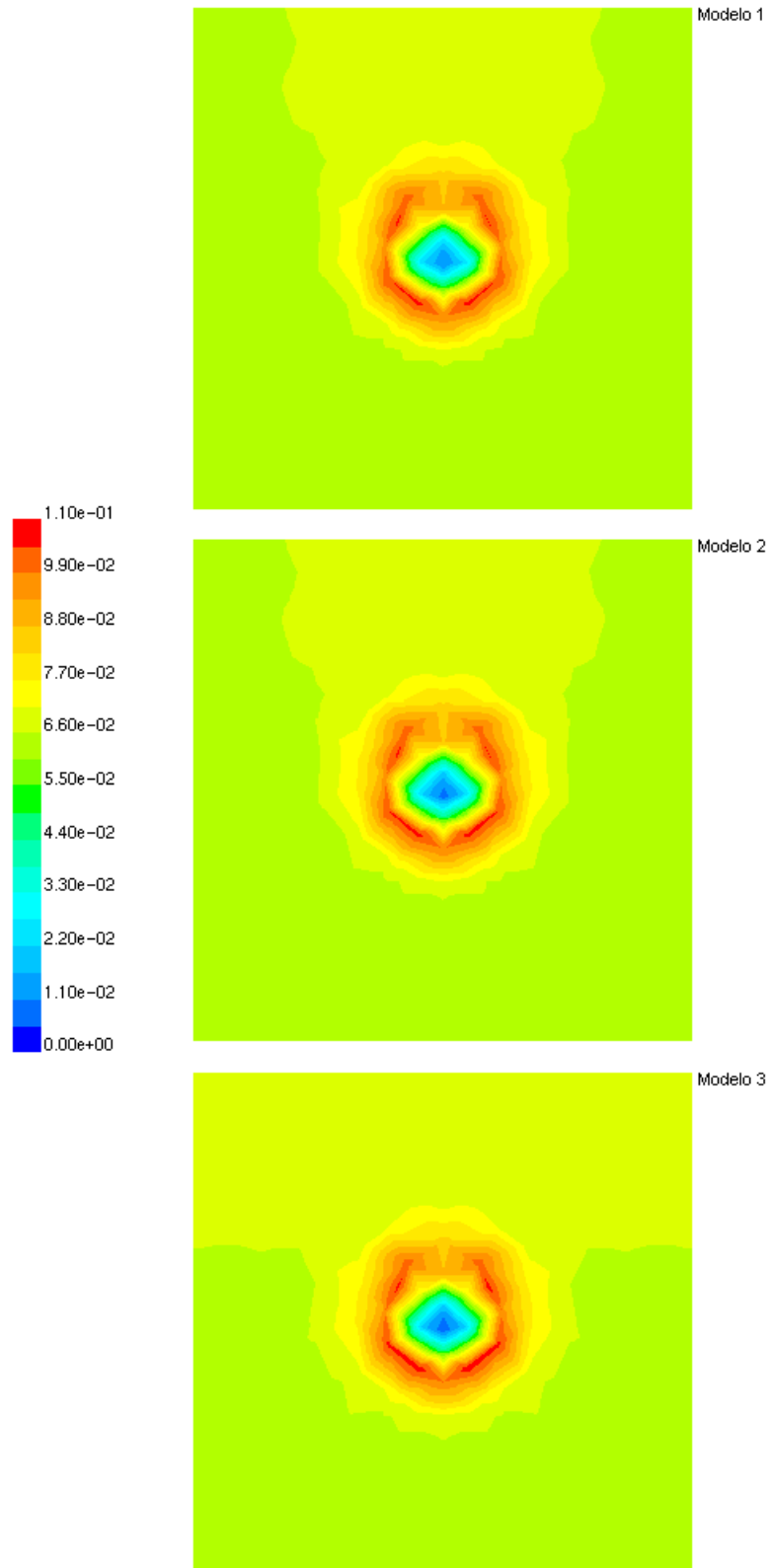


Figura 6.38: Percentagem de monóxido de carbono na fornalha, na cota *k015*, em função da distância radial ao centro.

Relativamente aos gases de combustão, o *Modelo 3* apresenta uma maior produção de  $\text{CO}_2$  (Figura 6.37), devido à estequiometria das reacções, agora, utilizadas. Mas, já na chaminé, onde são monitorizados os gases de combustão que saem para a atmosfera, foram tirados valores relativos à composição elementar dos mesmos (Quadro 6.6), onde se verifica que não existem variações significativas na percentagem dos vários constituintes.

Quadro 6.6: Temperatura e composição média (%) dos gases na chaminé, segundo os três modelos de combustão.

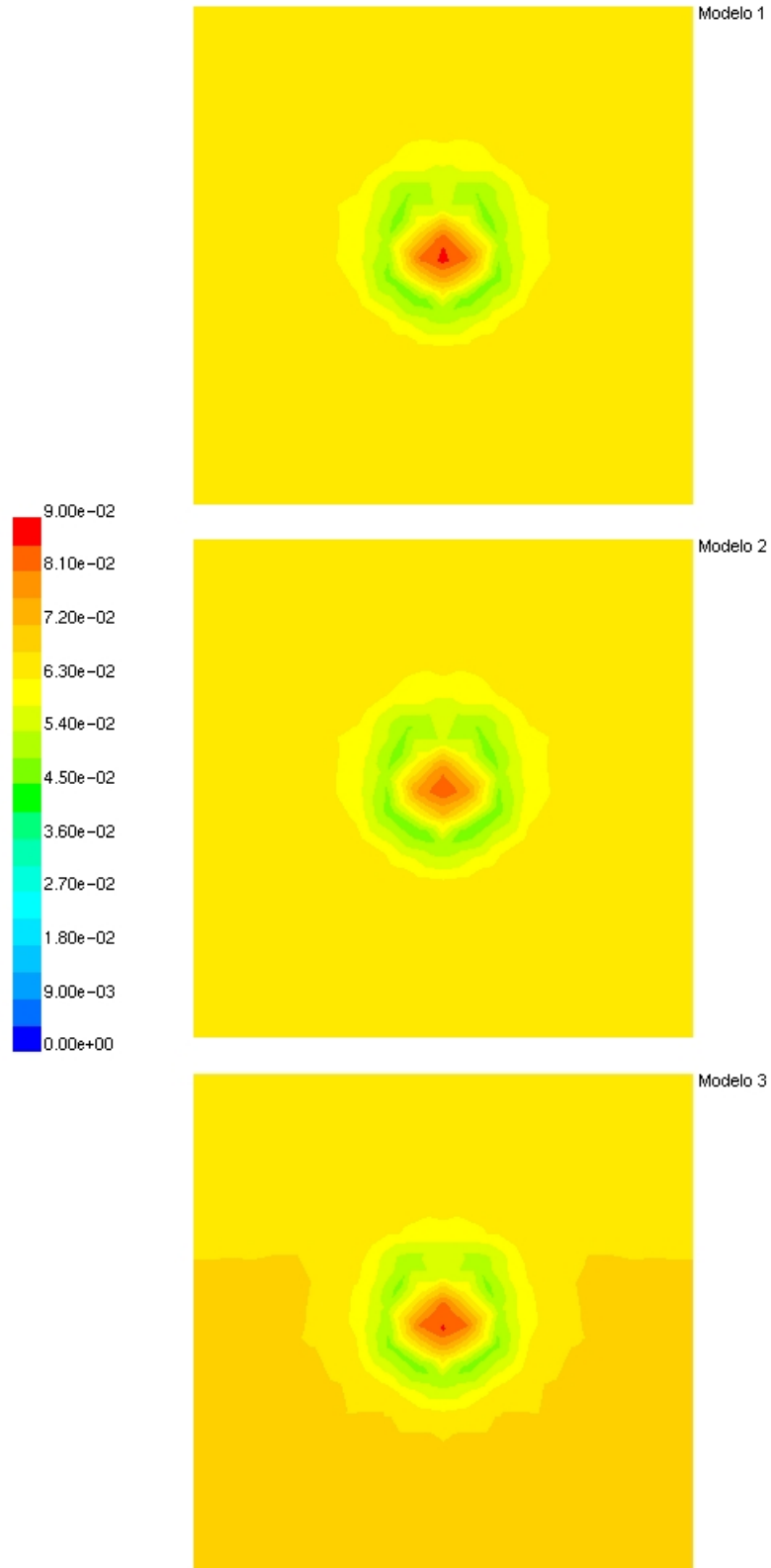
<i>Espécie química</i>	<i>Modelo 1</i>	<i>Modelo 2</i>	<i>Modelo 3</i>
$\text{CH}_4$	7,4391e-31	5,1524e-31	2,7000e-29
$\text{C}_2\text{H}_6$	-	-	-
$\text{C}_3\text{H}_8$	-	-	-
$\text{CO}$	-	2,6831e-29	3,4200e-28
$\text{CO}_2$	6,6594	6,6260	6,8160
$\text{H}_2\text{O}$	13,1431	13,1370	12,7186
$\text{O}_2$	6,3368	6,3676	6,4419
$\text{N}_2$	73,8607	73,8695	74,0235
$T_{\text{gases}} [\text{K}]$	1797,5	1795,3	1796,7



Contours of Mole fraction of o2

Dec 13, 1998  
FLUENT 5.0 (3d, segregated, spe8, ke)

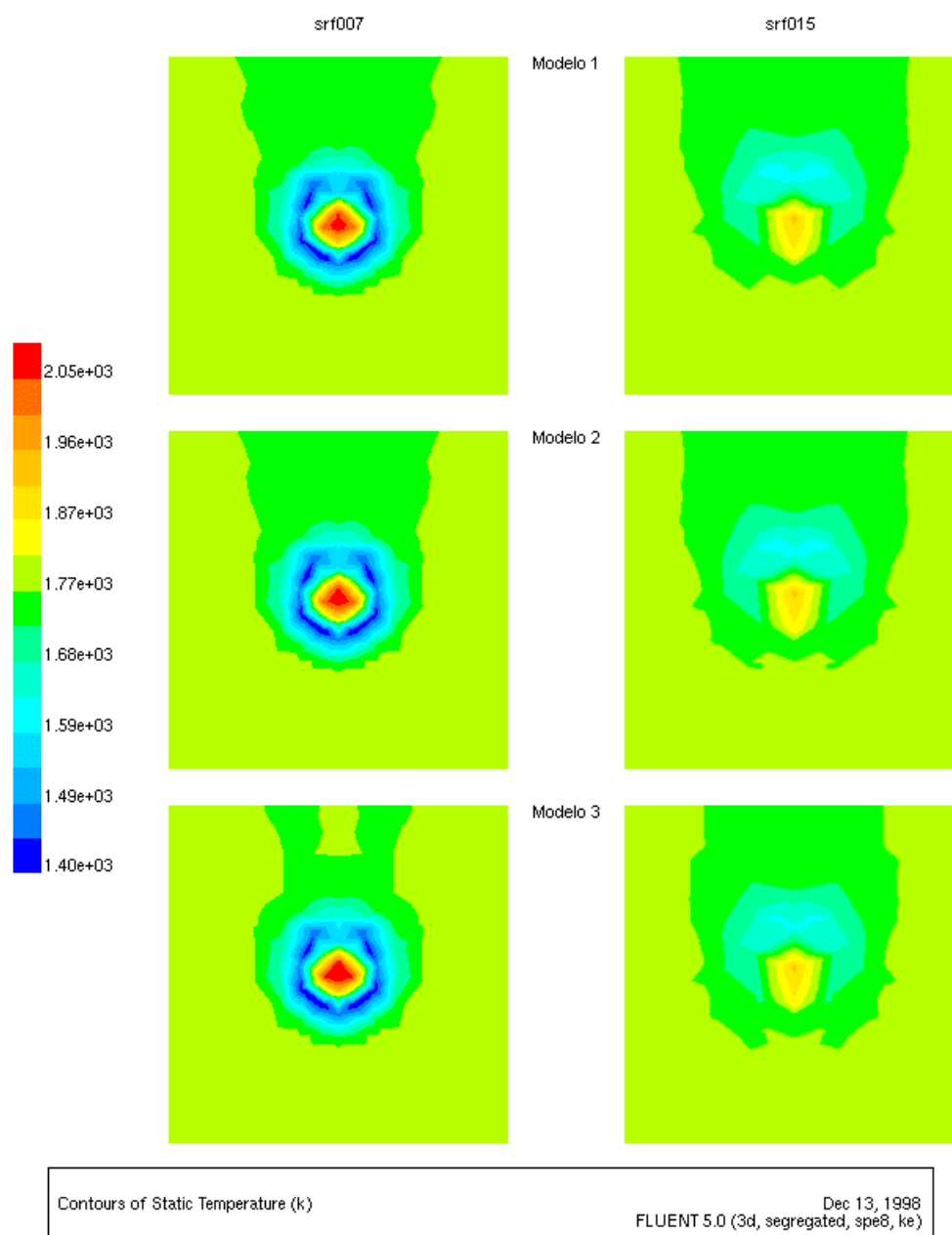
*Figura 6.39: Iso-linhas da fracção molar de  $O_2$ , para cada um dos modelos de combustão, no plano *srf007*.*



Contours of Mole fraction of co2

Dec 13, 1998  
FLUENT 5.0 (3d, segregated, spe8, ke)

*Figura 6.40: Iso-linhas da fracção molar de CO<sub>2</sub>, para cada um dos modelos de combustão, no plano *srf007*.*



*Figura 6.41: Iso-linhas de temperatura, para cada um dos modelos de combustão, nos planos srf007 e srf015.*

Visto que o *Modelo 1* não prevê a existência de monóxido de carbono, não se considera um modelo adequado para esta modelação, porque embora o CO não se faça notar nos gases de combustão, existe no interior da câmara de combustão sendo, portanto, reagente para a reacção que produz  $\text{CO}_2$ , segundo os restantes modelos.

As *Figuras 6.39 e 6.40*, mostram os perfis das fracções molares, quer do oxigénio, quer do dióxido de carbono e através delas é possível verificar, mais uma vez, que não

existem diferenças significativas entre o *Modelo 2* e o *Modelo 3*, o que, também se pode verificar pelas distribuições de temperatura em dois planos consecutivos, *srf007* e *srf015*, no início da fornalha (*Figura 6.41*), estes resultados associados ao elevado esforço computacional resultante da utilização do *Modelo 3*, por incluir mais duas reacções, que são resolvidas para todas as células do domínio em cada iteração, conduzem à não utilização deste modelo, o que já seria de prever, após o conhecimento da composição elementar da mistura combustível.

## 6.5 Sumário

Neste capítulo começou por se definir qual a malha a utilizar com três possibilidades, uma de 31 067, uma de 78 003 e uma de 1200 00 células. Visto a reticulação da malha de 31 067 células ser muito baixa, e por a malha de 120 000 células exigir um esforço computacional extremamente elevado, em face dos recursos disponíveis, optou-se pela utilização de uma malha intermédia.

Seguidamente, foi escolhido o modelo de turbulência, com base nos resultados de um escoamento isotérmico. Entre os modelos  $k-\varepsilon$ , *RNG* e *RSM*, este último, por utilizar mais seis equações que os restantes, logo maiores necessidades de computação, foi preterido para os restantes. Visto que o modelo *RNG* não apresenta grandes diferenças para o modelo  $k-\varepsilon$ , excepto no tratamento do efeito parietal, aqui pouco significativo, e que demora cerca de 30 % mais a convergir para a solução, foi escolhido o modelo  $k-\varepsilon$  para a turbulência.

Num sistema com combustão, torna-se necessário definir um modelo de radiação, visto que existem temperaturas muito elevadas e a radiação é emitida com base na quarta potência da temperatura. Foi possível comparar um modelo discreto de radiação, o *DTRM*, com o caso mais simples do Modelo P-N, o P-1, e com um modelo de aproximação estatística, o Rosseland. Foi escolhido o *DTRM*, porque o Rosseland não se verifica adequado para este tipo de sistema e o P-1 exige um maior esforço computacional.

Utilizando o sistema de radiação descrito pelo *DTRM* tornou-se necessário definir o número de direcções discretas de radiação a considerar. Foram testados casos com 4,



9, 16, 25 e 36 raios. Verificou-se que, a partir de 9 raios, os resultados não apresentam variações, daí que para diminuir o espaço ocupado em disco, esta foi a discretização preferida.

Estudaram-se, ainda, os modelos cinéticos de combustão. Entre os modelos utilizados, o *Modelo 1 - Mecanismo de passo único*, o *Modelo 2 - Mecanismo de duplo passo*, e o *Modelo 3 - Mecanismo de duplo passo multi-percursor*, foi escolhido o *Modelo 2*, visto que o *Modelo 1* não prevê a existência de monóxido de carbono e o *Modelo 3* inclui mais duas reacções, que são resolvidas para todas as células do domínio em cada iteração.

---

# Capítulo VII

## **7 Ensaaios numéricos**

Após a definição dos principais parâmetros a utilizar (*Capítulo VI*) e da realização de alguns ensaios experimentais, para validação do modelo (*Capítulo V*), torna-se necessário complementar o trabalho através da realização de simulações que permitam uma afinação do modelo e posterior comparação dos resultados com os ensaios de validação.

Para realizar a validação do modelo torna-se necessário verificar se as respostas do modelo desenvolvido são idênticas às respostas dos ensaios para validação do modelo, quer ao nível dos balanços elementares, quer ao nível dos balanços energéticos.

### **7.1 Balanço elementar**

No que respeita ao balanço elementar do sistema pode-se verificar que para as principais espécies possíveis de medir e de calcular, respectivamente, de forma experimental e numérica, ou seja, o oxigénio e o dióxido de carbono existente nos gases de combustão estão de acordo um com a outra. Este estudo não abrange a água contida nos gases, porque as medições, nos ensaios de validação, foram efectuadas em base seca.

Como se pode observar pelas *Figuras 7.1 e 7.2*, apresentadas na página seguinte, a resposta do modelo para as duas substâncias, acima mencionadas, é francamente boa, não apresentando, ao longo de toda a gama de funcionamento considerada, variações relativamente aos ensaios experimentais.

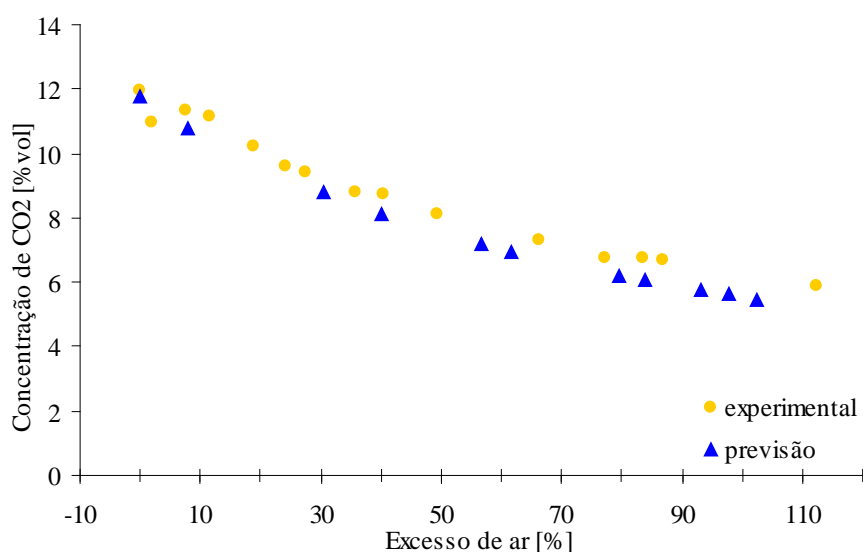


Figura 7.1: Comparação dos teores de CO<sub>2</sub> (em base seca) à saída da fornalha, obtidos por medição experimental e por previsão, segundo o modelo proposto.

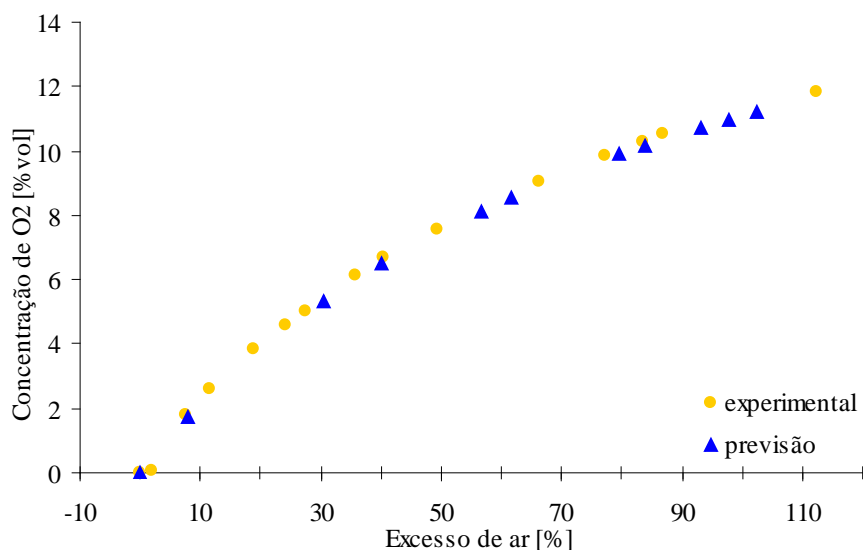
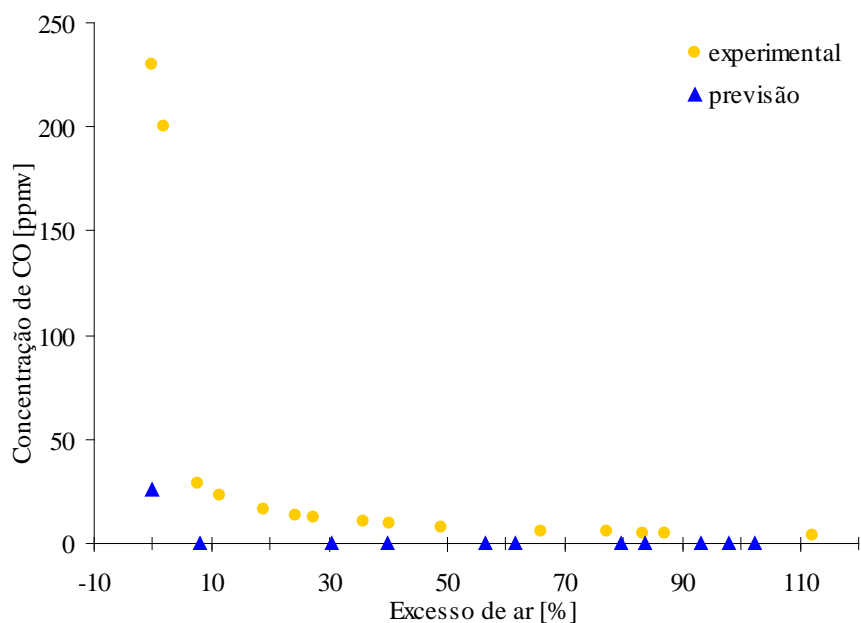


Figura 7.2: Comparação dos teores de O<sub>2</sub> (em base seca) à saída da fornalha, obtidos por medição experimental e por previsão, segundo o modelo proposto.

Ainda do ponto de vista de balanço elementar, verificaram-se alguns problemas no que respeita à previsão do teor de monóxido de carbono nos gases de combustão, de tal forma que nos ensaios de validação foi medido CO em toda a gama de funcionamento proposta para a fornalha, mas no modelo só foi possível prever a existência de monóxido de carbono nos gases de combustão, em simulações com excesso de ar próximo do estequiométrico (*Figura 7.3*).



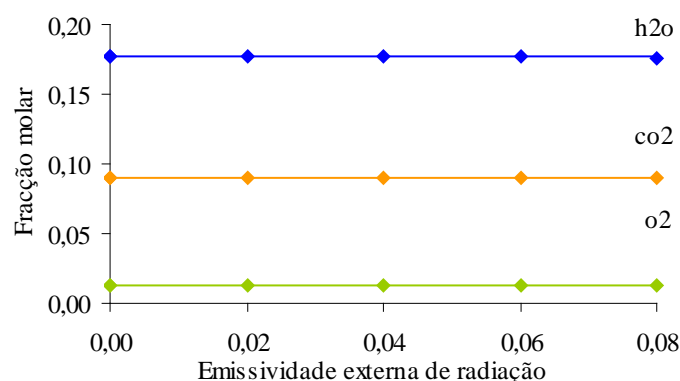
*Figura 7.3:* Comparação dos teores de CO (em base seca) à saída da fornalha, obtidos por medição experimental e por previsão, segundo o modelo proposto.

Embora o combustível seja gasoso, o que deveria promover uma mistura combustível-comburente mais homogênea que no caso da utilização de combustíveis sólidos ou líquidos, é de certa forma aceitável que seja possível realizar medições de CO, nos ensaios de validação, em toda a gama de funcionamento, visto que o erro associado ao analisador é de 1% da escala, sendo esta de 0 a 1000 ppmv, o que significa que quando se mede valores inferiores a 10 ppmv estamos na presença de valores que se encontram na zona do erro de medição do aparelho. Daqui se pode concluir que todos os pontos experimentais acima de cerca de 25 % de excesso de ar não têm significado como valores para validação do modelo.

Ainda no que respeita ao comportamento das espécies químicas ( $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$  e  $CH_4$ ), foi considerado um caso tipo em funcionamento adiabático, por forma a tornar possível a observação do comportamento das espécies em função do aumento do excesso de ar (*Figuras 7.5 a 7.14*). Nestas condições, foram consideradas dez situações distintas no que respeita ao excesso de ar, cujos valores abrangeram uma gama de utilização dos 0 aos 90 % de excesso de ar, com valores discretizados de 10 em 10 %.

Para além da influência do excesso de ar, foi, também, estudada a influência do parâmetro emissividade externa de radiação na formação / destruição das espécies químicas utilizadas. Para este estudo, foram realizados diversos ensaios numéricos com perdas de calor pelas paredes definidas no volume de controle, que se regem pelas *Equações 7.3 a 7.6* (*Secção 7.2.1*), com valores de emissividade externa a variar de 0,00 (só convecção) a 0,08 com passo de 0,02.

Tal como se mostra na *Figura 7.4* (para as espécies vapor de água, dióxido de carbono e oxigénio, sendo estas as que apresentam os teores mais elevados), pode-se verificar que o mencionado parâmetro não apresenta influência na composição dos gases de combustão, visto que as variações para espécies  $H_2O$  e  $CO_2$  se encontram abaixo de 0,1 % e para a espécie  $O_2$  são da ordem de 1 %.



*Figura 7.4:* Fracções molares dos principais constituintes dos gases de combustão (em base húmida) em função do valor da propriedade emissividade externa.

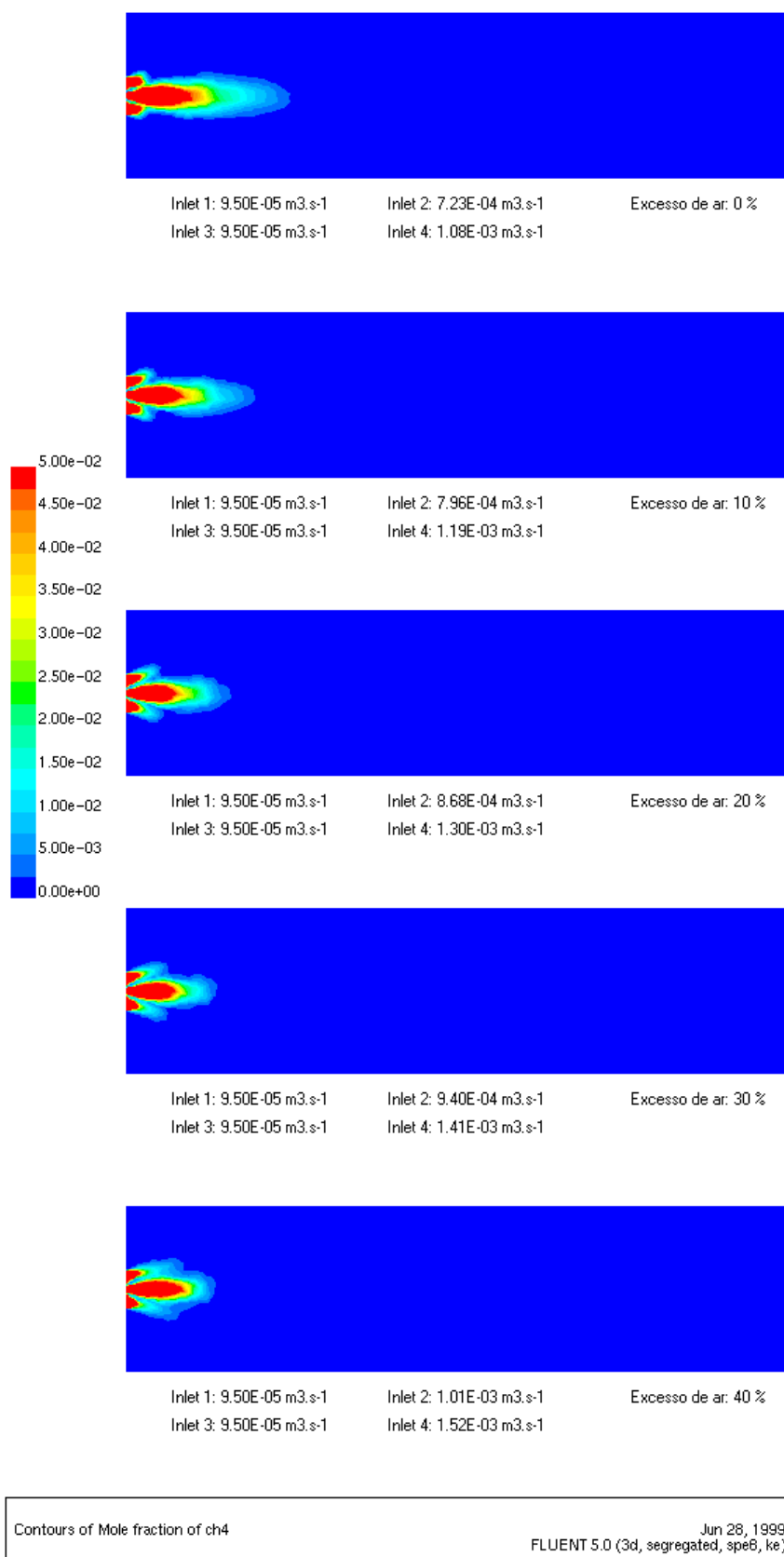


Figura 7.5: Fração molar da espécie química  $\text{CH}_4$ , para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

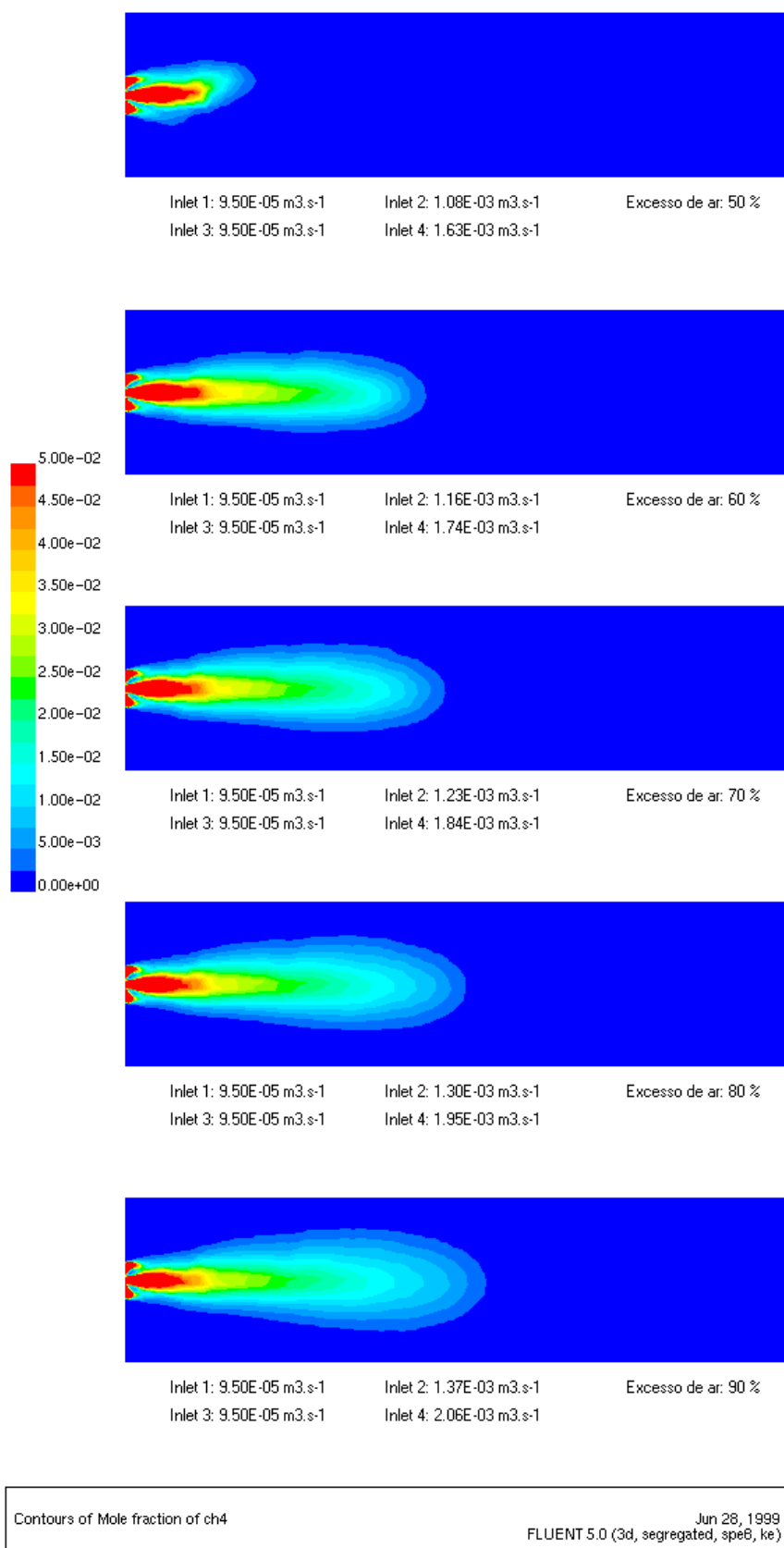


Figura 7.6: Fracção molar da espécie química  $\text{CH}_4$ , para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

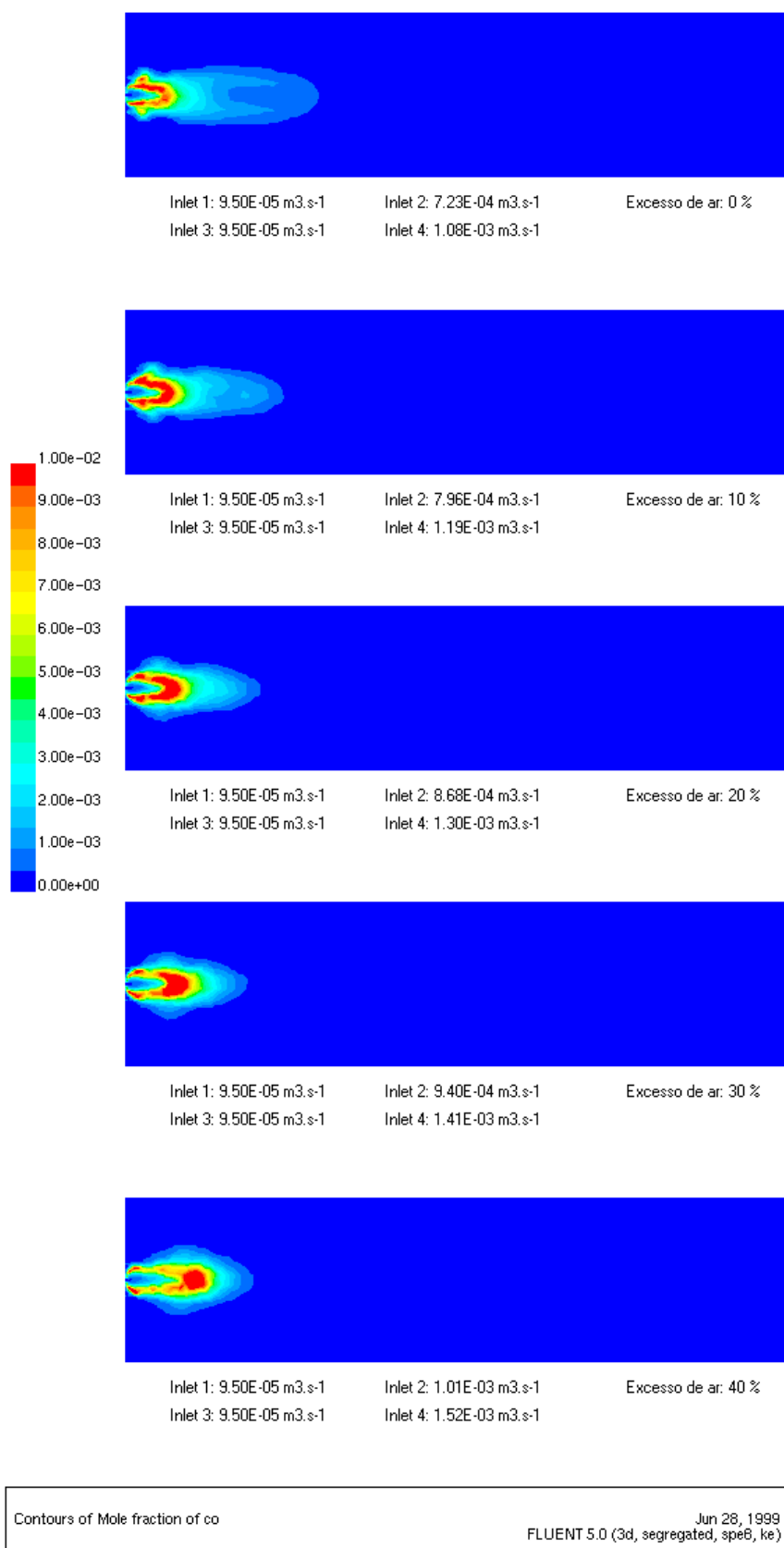


Figura 7.7: Fracção molar da espécie química CO, para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.



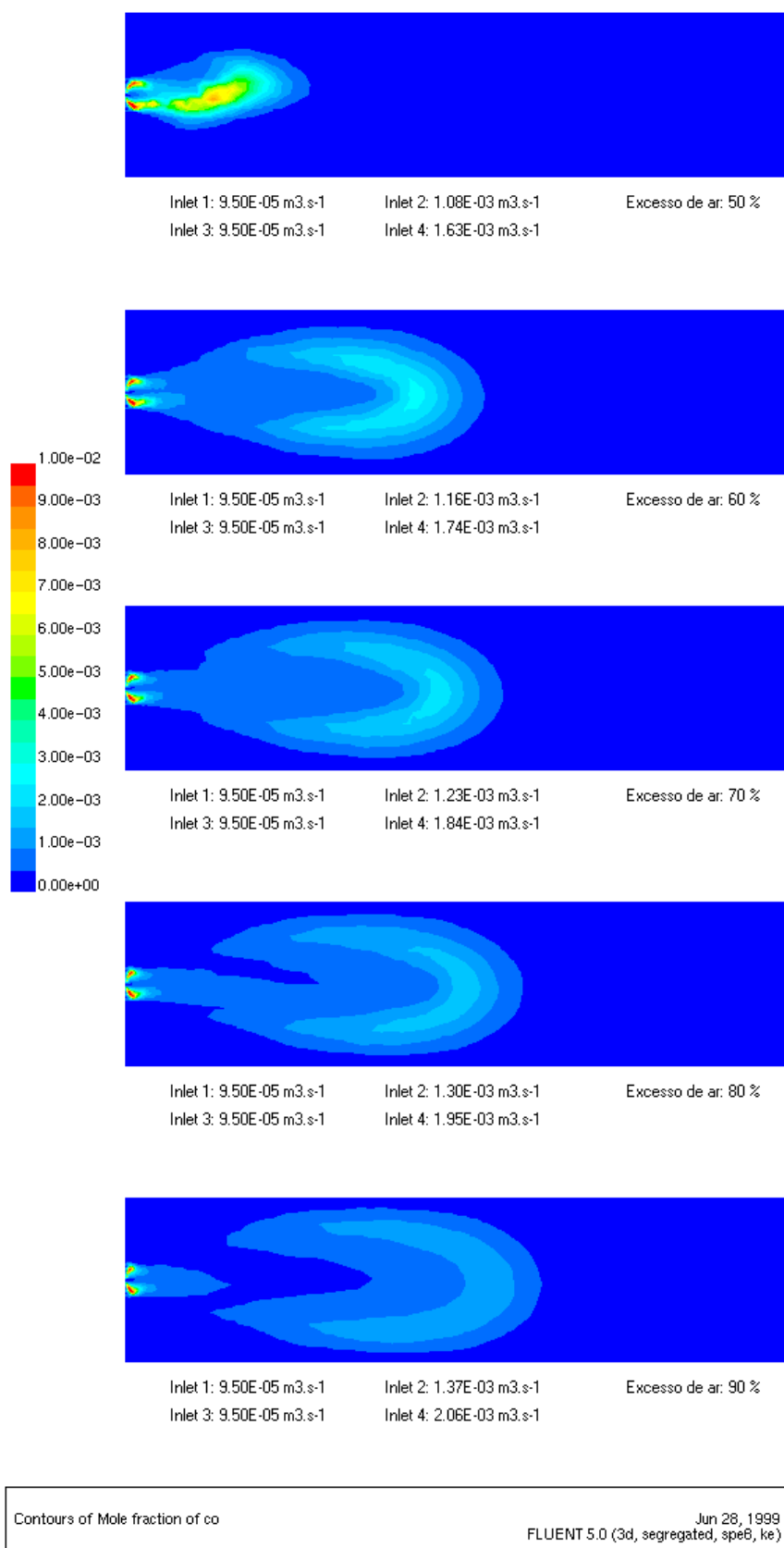


Figura 7.8: Fracção molar da espécie química CO, para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

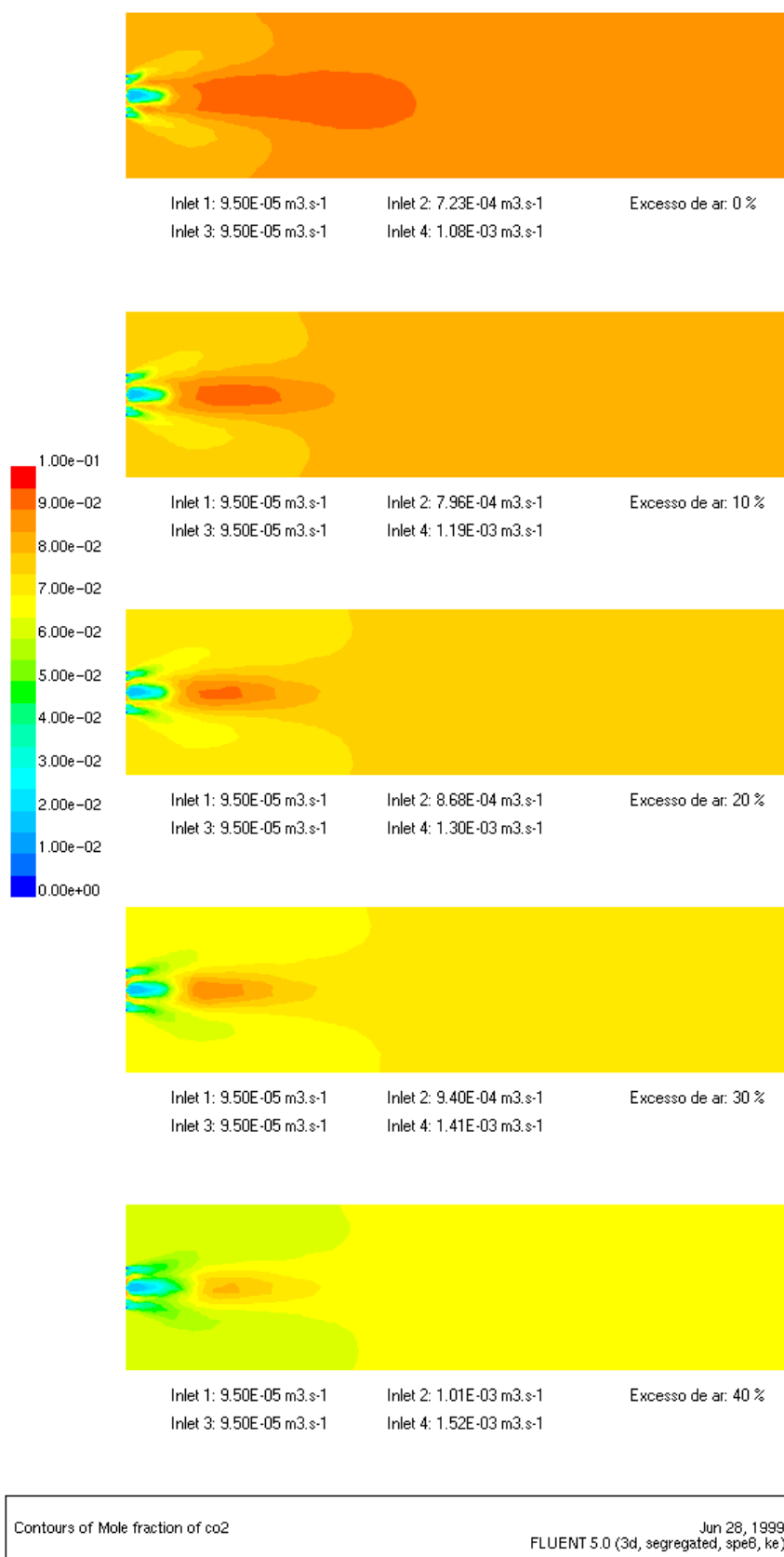


Figura 7.9: Fracção molar da espécie química CO<sub>2</sub>, para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

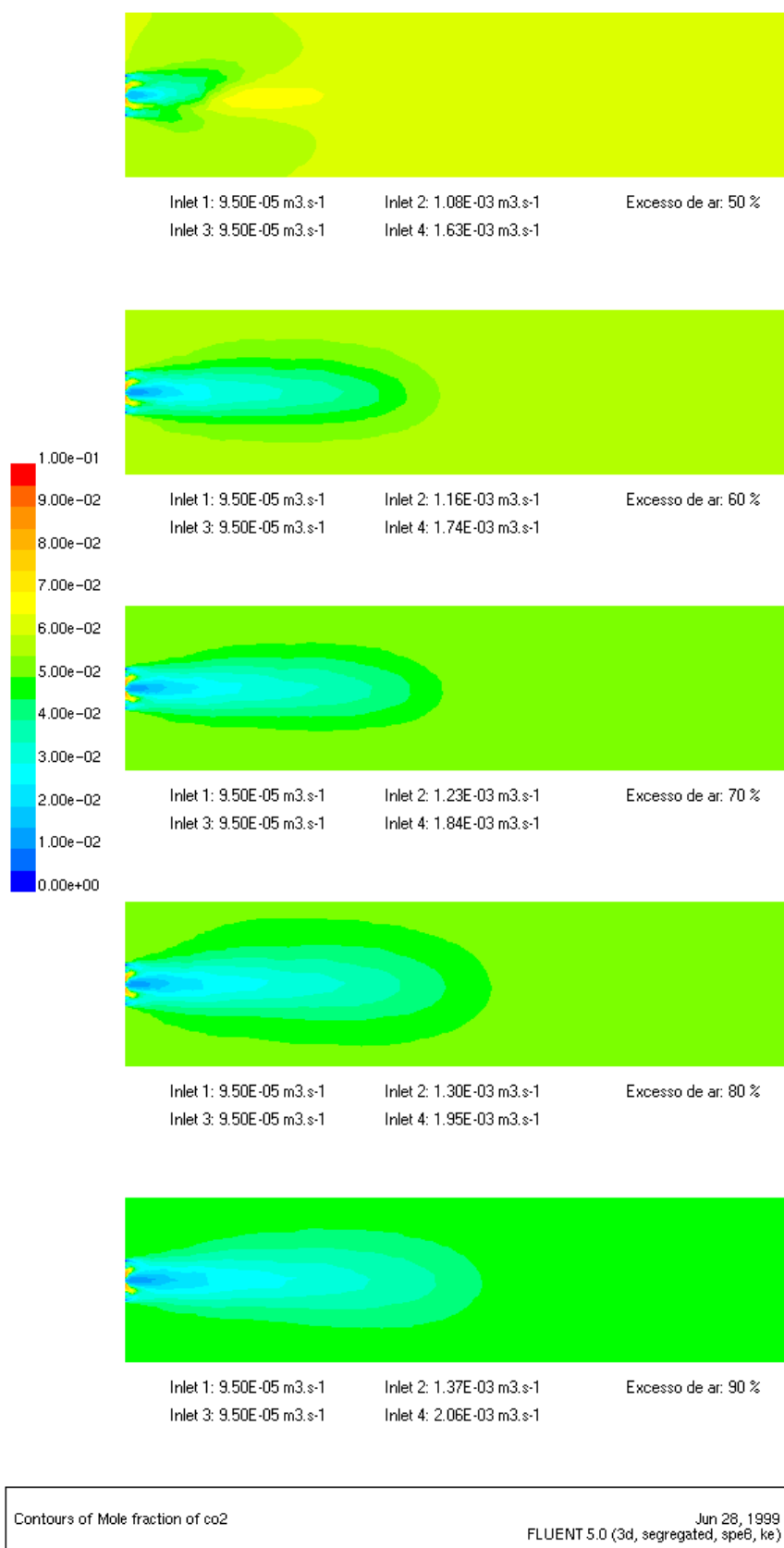


Figura 7.10: Fracção molar da espécie química CO<sub>2</sub>, para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

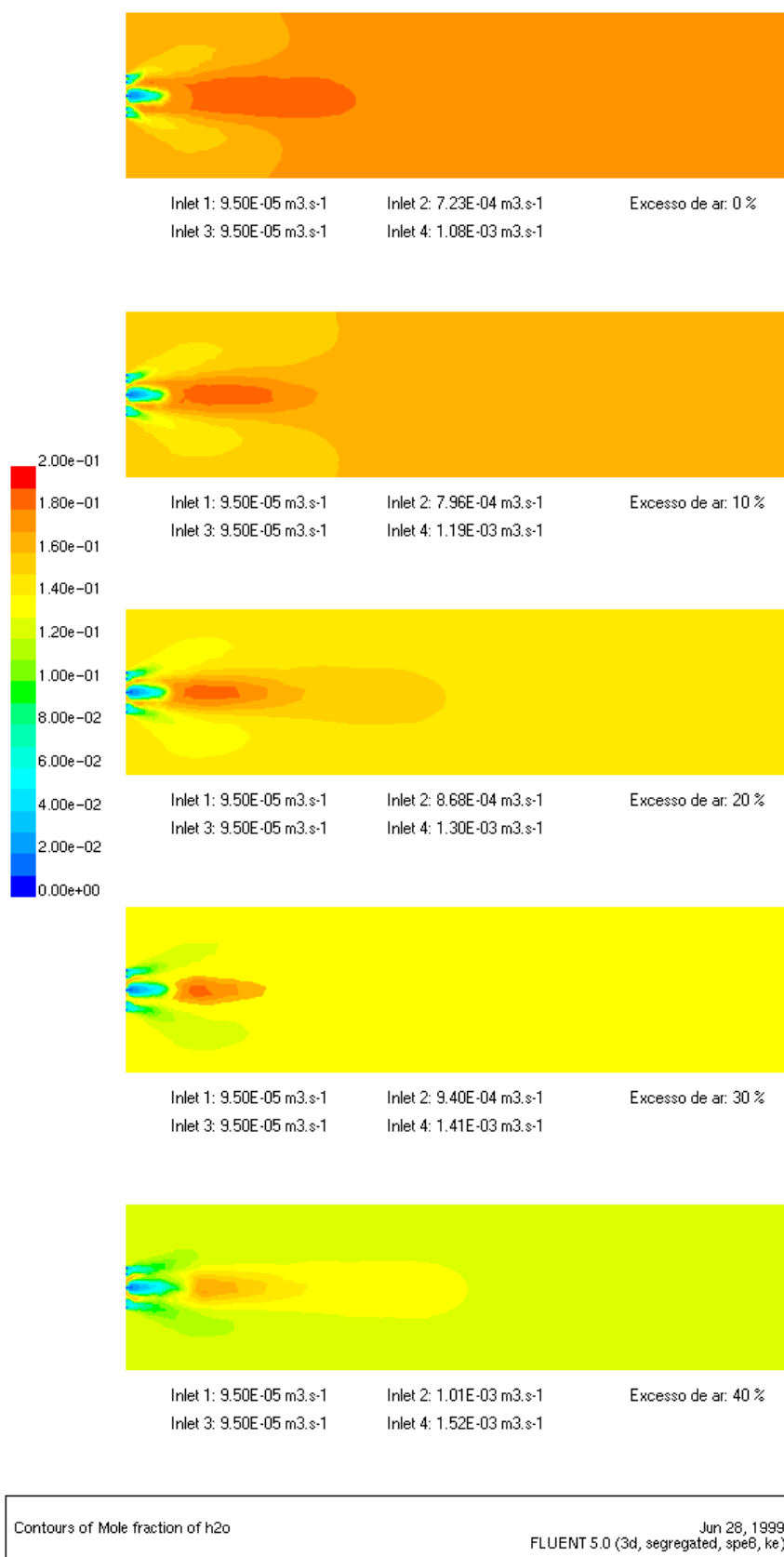


Figura 7.11: Fracção molar da espécie química  $H_2O$ , para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

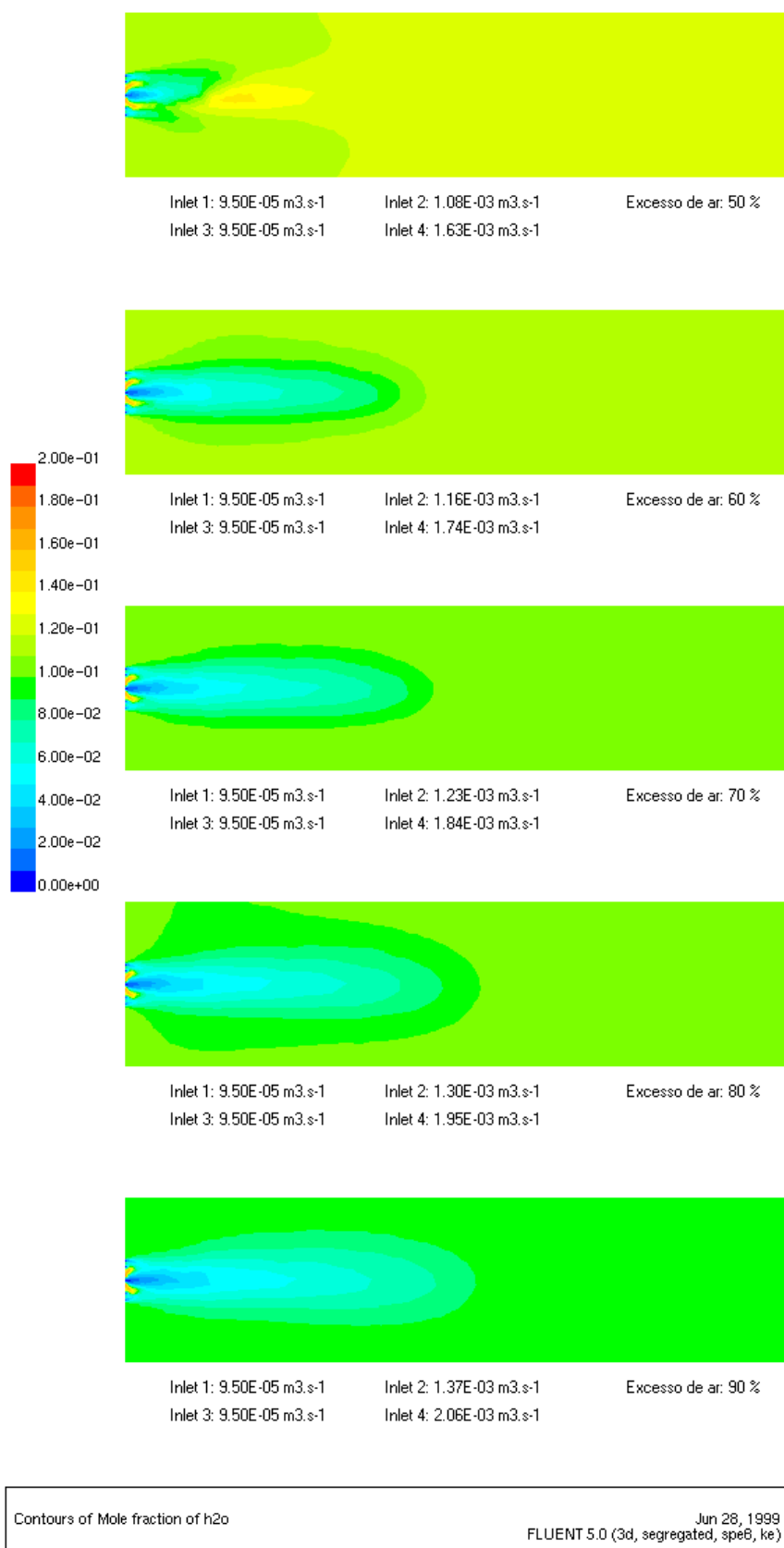


Figura 7.12: Fracção molar da espécie química  $H_2O$ , para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

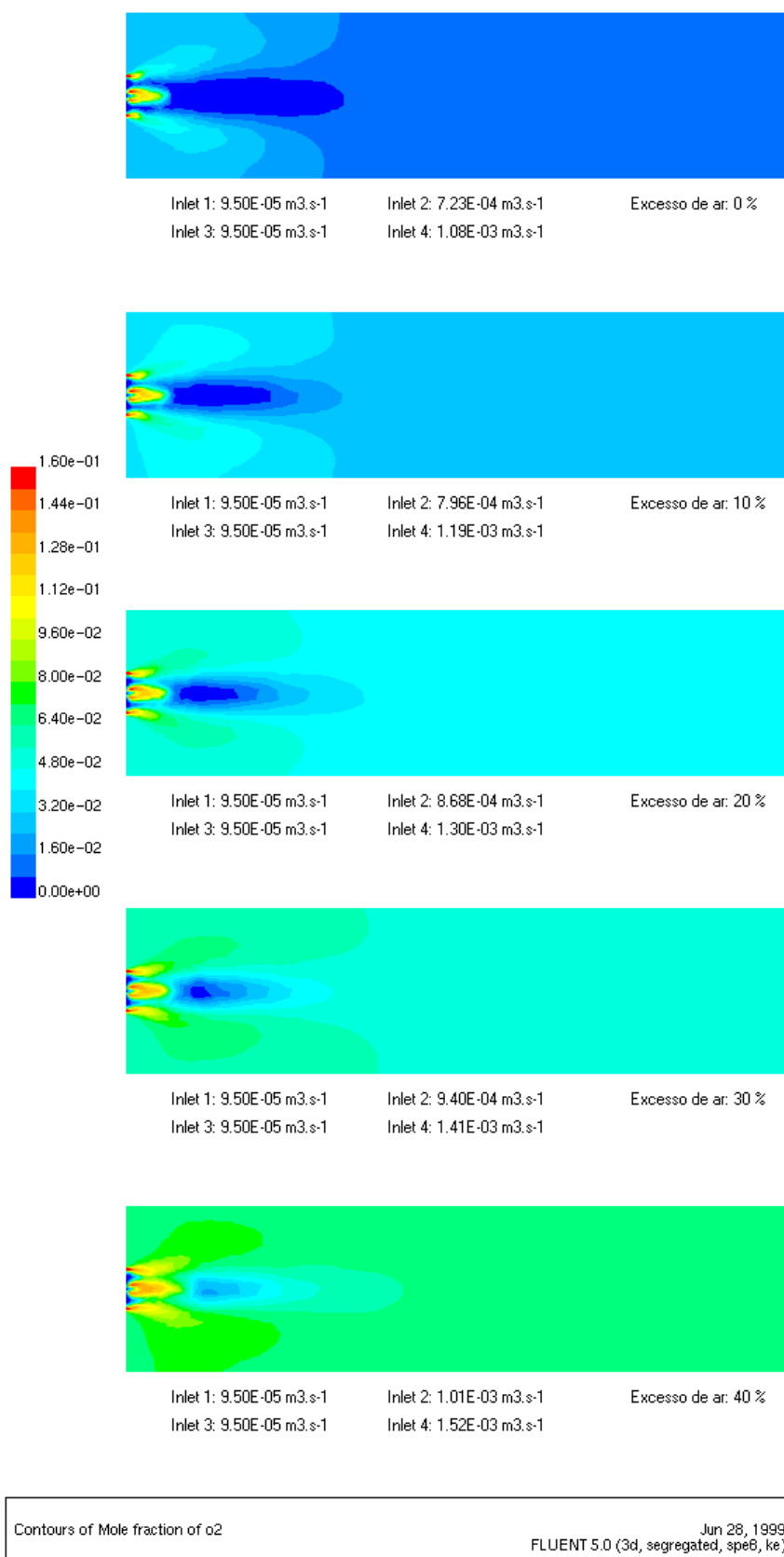


Figura 7.13: Fracção molar da espécie química  $O_2$ , para diferentes condições de funcionamento (0 a 40 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

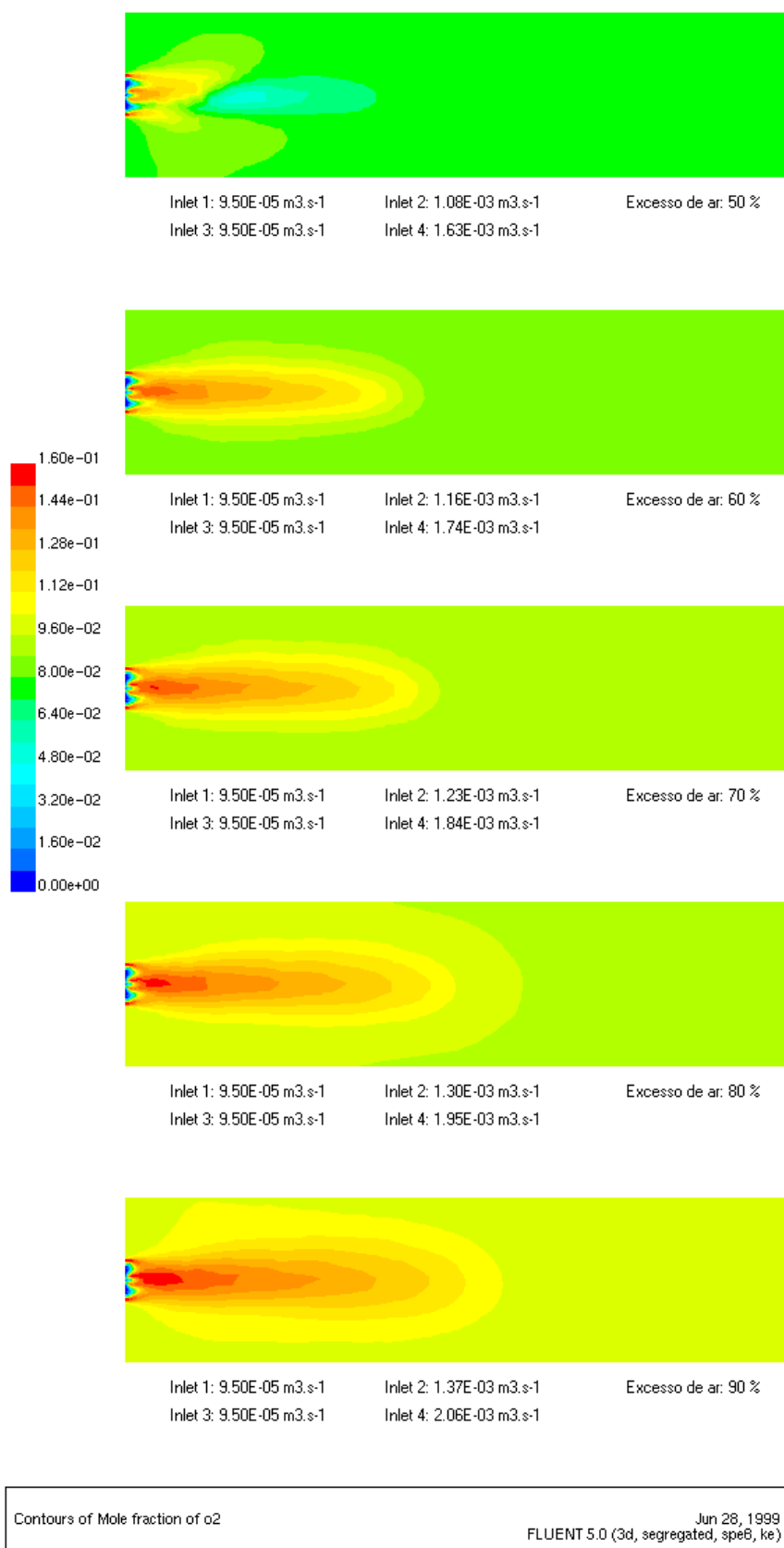


Figura 7.14: Fração molar da espécie química  $O_2$ , para diferentes condições de funcionamento (50 a 90 % de excesso de ar), em corte longitudinal.

## 7.2 Balanço energético

Por forma a afinar o modelo foram executadas algumas variações na definição do caso, ao nível dos parâmetros coeficiente de absorção e emissividade externa da fornalha (de valor nulo ou calculado através da utilização do modelo WSGG – “Weighted Sum of Grey Gases”). Qualquer um dos parâmetros mencionados apresenta diferenças significativas relativamente às definições, por defeito, do programa, que inclui quer a emissividade externa, quer o coeficiente de absorção constantes, de valor nulo. Em função destas definições por defeito, o sistema é considerado como adiabático e não tem absorção de radiação por parte das espécies  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , principalmente.

### 7.2.1 Coeficiente de absorção

O estudo do coeficiente de absorção pode influenciar a afinação modelo. Este parâmetro foi avaliado através da comparação dos resultados provenientes de dois valores distintos assumidos para este parâmetro, o primeiro em que o parâmetro assumiu um valor nulo (default), que significa que o gás se comporta como um gás transparente à radiação, ou seja, a radiação emitida pelas paredes, ao atravessar o percurso óptico, não é absorvida pelos gases de combustão, nomeadamente pelo vapor de água e pelo dióxido de carbono, e o segundo onde o parâmetro não assume um valor constante, mas onde o parâmetro é calculado através do modelo WSGG.

O modelo WSGG permite estimar, localmente, o valor do coeficiente de absorção,  $a$ , como função da composição da fase contínua. Para este modelo, o pressuposto básico assenta no facto da emissividade total, através de uma distância,  $s$ , poder ser representada por (Lallement *et al.*, 1996 e Smith *et al.*, 1982):

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^I a_{\varepsilon,i}(T) [1 - \exp(-\kappa_i p s)] \quad (\text{Equação 7.1})$$

onde  $a_{\varepsilon,i}$  é o factor de emissividade ponderado para o gás opaco fictício,  $i$ , a quantidade entre parênteses rectos é a emissividade do gás opaco fictício  $i$ ,  $\kappa_i$  o seu coeficiente de absorção,  $p$  o somatório das pressões parciais de todas as espécies absorventes que constituem o gás, e  $s$  a distância percorrida pelo raio. Os valores de  $a_{\varepsilon,i}$  e  $\kappa_i$  dependem da temperatura e composição dos gases. A dependência entre  $a_{\varepsilon,i}$  e a temperatura é, normalmente, apresentada como uma função polinomial do tipo (Smith *et al.*, 1982):



$$a_{\varepsilon,i} = \sum_{j=1}^J b_{\varepsilon,i,j} T^{j-1} \quad (\text{Equação 7.2})$$

onde  $b_{\varepsilon,i,j}$  são os coeficientes polinomiais da emissividade do gás a variar com a temperatura. Os coeficientes  $b_{\varepsilon,i,j}$  e  $\kappa_i$  são estimados por ajuste da *Equação 7.1* a valores experimentais de emissividade (Smith *et al.*, 1982; Denison e Webb, 1993 e Coppalle e Vervish, 1983).

A absorptividade,  $\alpha$ , da radiação das paredes pode ser estimada de forma semelhante (Smith *et al.*, 1982), no entanto, para simplificar os cálculos foi assumido que  $\varepsilon = \alpha$  (Modest, 1991), pressuposto válido sempre que o meio seja, opticamente, longo e não existam diferenças consideráveis entre as temperaturas das paredes e do gás envolvente.

Uma vez que os coeficientes  $b_{\varepsilon,i,j}$  e  $\kappa_i$  variam lentamente com  $p$ ,  $s$  e  $T$ , eles podem ser considerados constantes para uma gama alargada desses parâmetros. Para pressões totais de, aproximadamente, 1 atm e diferentes combinações de pressões relativas de CO<sub>2</sub> e vapor de água, os valores apresentados por Smith *et al.* (1982) são válidos para  $0,001 \leq p.s \leq 10,0$  atm.m e  $600 \leq T \leq 2400$  K. Para temperaturas superiores a 2400 K, são utilizados os valores sugeridos por Coppalle e Vervish (1983).

A estimativa do coeficiente de absorção dos gases, no interior da fornalha, utilizando o Modelo WSGG, produziu diferenças significativas, em relação aos resultados com coeficiente de absorção constante (*Figuras 7.15 e 7.16*). Na prática, este modelo provoca uma diminuição das temperaturas média e máxima dos gases, bem como um aumento generalizado da temperatura média das paredes, o que provoca diminuições acentuadas na temperatura de saída dos gases da fornalha. A maior absorção de energia pelos gases limita as transferências de calor por radiação a uma zona muito próxima do queimador.

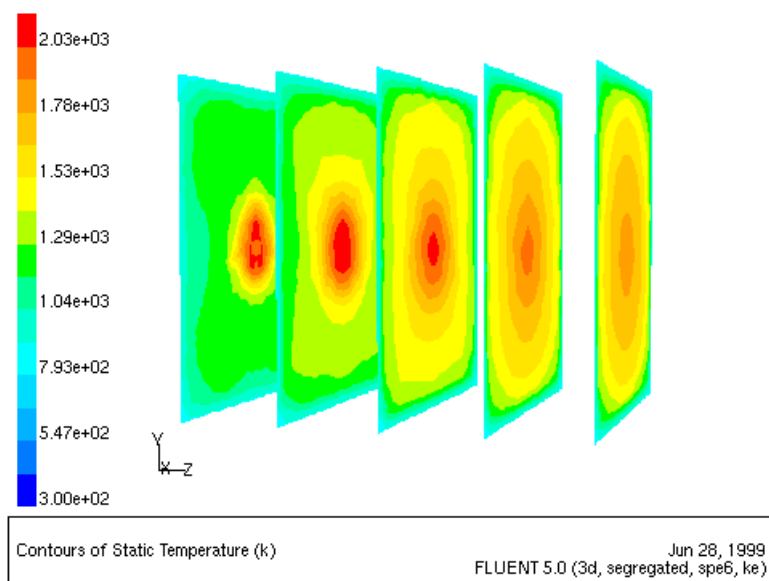


Figura 7.15: Perfis de temperatura dos gases de combustão em *srf015*, *srf030*, *srf045*, *srf060* e *srf075*, com  $a = 0$ .

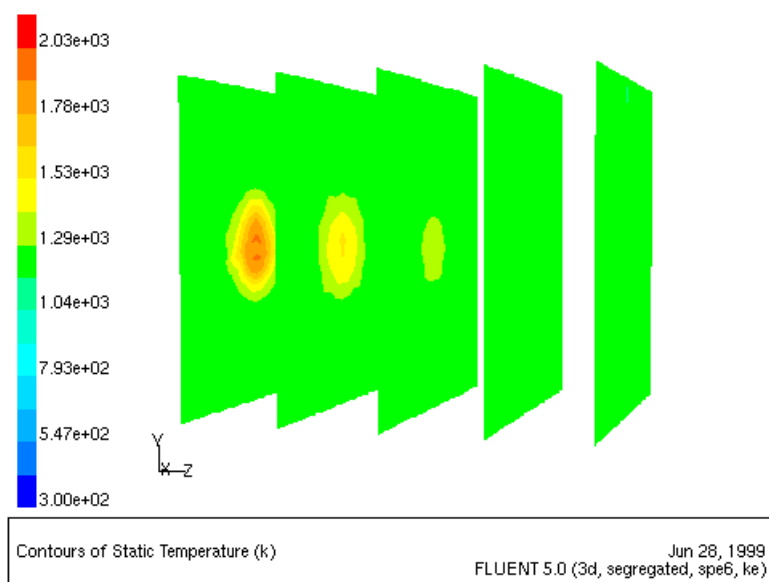


Figura 7.16: Perfis de temperatura dos gases de combustão em *srf015*, *srf030*, *srf045*, *srf060* e *srf075*, com  $a = \text{WSGGM}$ .

### 7.2.2 Emissividade externa de radiação

A possibilidade de combinação das características térmicas internas com as condições de fronteira de transferência de calor convectivo e radiativo para o exterior da fornalha, permite simular situações não adiabáticas. A resistência externa à transferência de calor convectivo é definida através de um coeficiente de transferência externo,  $h_{ext}$ , e de uma temperatura ambiente externa,  $T_{ext}$ :

$$q'' = h_{ext}(T_{ext} - T_w) = h_f(T_w - T_f) = h(T_{ext} - T_f) \quad (\text{Equação 7.3})$$

onde  $T_w$  é a temperatura da parede,  $h_f$  é o coeficiente de transferência de calor no fluido,  $T_f$  é a temperatura do fluido e  $h$  é o coeficiente global de transferência de calor, definido como:

$$h = \frac{1}{\frac{1}{h_f} + \frac{1}{h_{ext}}} \quad (\text{Equação 7.4})$$

É, igualmente, possível definir quer as condições próximas da fronteira que descrevem a resistência à transferência de calor por radiação, através da emissividade dos gases,  $\varepsilon_{gc}$ , do coeficiente da absorção,  $\alpha$ , e da temperatura dos gases,  $T_{gc}$ , como (Edwards e Matavosian, 1984)

$$q'' = \varepsilon_{gc} \sigma T_{gc}^4 - \alpha \sigma T_w^4 \quad (\text{Equação 7.5})$$

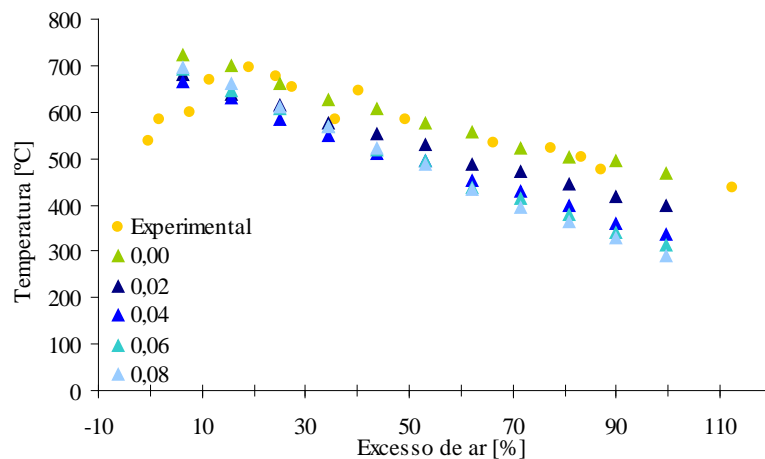
onde  $\sigma$  é a constante de Stefan- Boltzmann, quer definir as condições de fronteira que descrevem a resistência externa à transferência de calor por radiação, através da emissividade externa das paredes,  $\varepsilon_{ext}$ , e da temperatura do meio envolvente,  $T_\infty$  (não necessariamente idêntica a  $T_{ext}$ ).

$$q'' = \varepsilon_{ext} \sigma (T_\infty^4 - T_w^4) \quad (\text{Equação 7.6})$$

A combinação dos efeitos radiante e convectivo na transferência de calor para o exterior resulta no fluxo de calor calculado através da *Equação 7.7*.

$$q'' = h_{ext}(T_{ext} - T_w) + \varepsilon_{ext} \sigma (T_\infty^4 - T_w^4) = h_f(T_w - T_f) \quad (\text{Equação 7.7})$$

Com base na possibilidade de utilização deste parâmetro para afinação da temperatura de saída dos gases de combustão, foram efectuados alguns testes por forma a determinar como varia a temperatura dos gases de combustão em função da variação deste parâmetro (*Figura 7.17*).



*Figura 7.17:* Comparação da temperatura dos gases de combustão à saída da fornalha obtidos por medição experimental e por previsão, segundo diferentes valores assumidos pelo parâmetro emissividade externa de radiação.

Tendo em conta que as variações introduzidas no parâmetro emissividade externa de radiação influenciam as perdas de calor pelas paredes, torna-se possível verificar a evolução deste resultado pela *Figura 7.18*.

Embora não tenham sido realizados ensaios com valores do parâmetro emissividade externa de radiação entre 0,00 (que apenas calcula a convecção natural) e 0,02, a extrapolação do resultado proveniente da utilização deste parâmetro na proximidade imediata de 0,00 é concordante com os valores experimentais apresentados no *Quadro 5.4* e com a série de 0,00 apresentada na *Figura 7.17*.

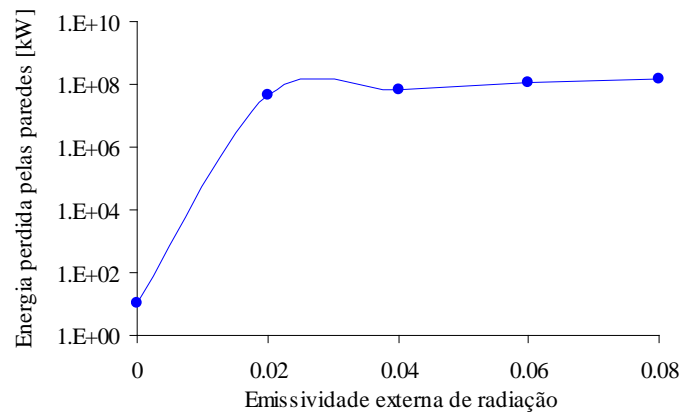


Figura 7.18: Comportamento da energia perdida pelas paredes da fornalha em função do parâmetro de emissividade externa de radiação adotado.

Por forma a verificar as alterações produzidas em termos de velocidade de escoamento pela alteração do parâmetro emissividade externa de radiação foi necessário modificar a escala de trabalho, ou seja, os valores de 0,00 a 0,08 não apresentavam variações observáveis na velocidade de escoamento dos gases, o que levou à utilização de valores entre 0,00 e 0,50 discretizados de 0,10 em 0,10 excepto para o caso de 0,05, para permitir a observação algumas variações da velocidade do escoamento da fase continua (Figuras 7.19 a 7.23).

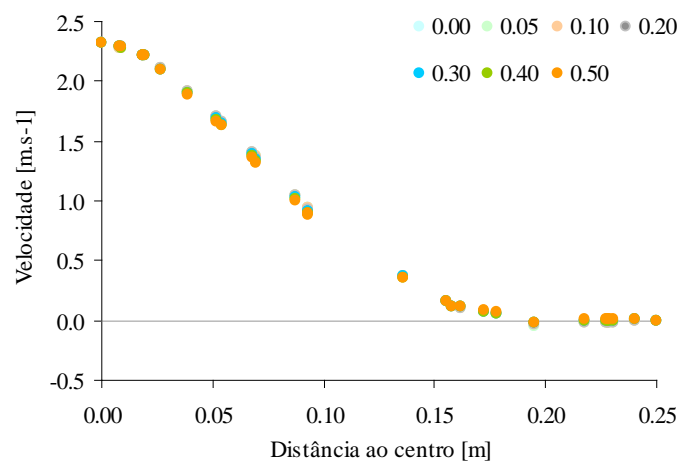


Figura 7.19: Comparação da Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota k015.

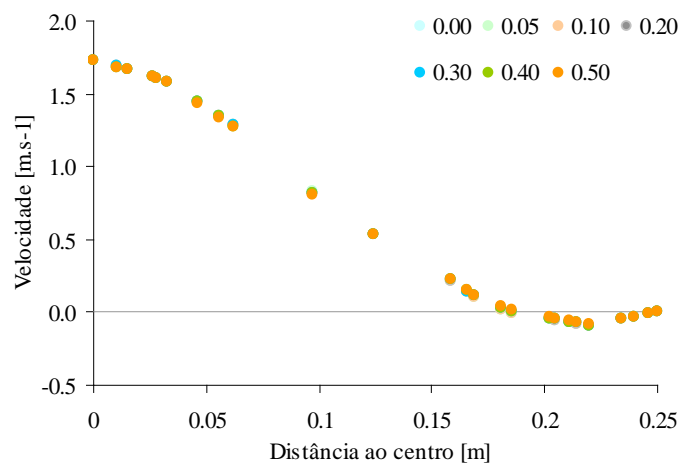


Figura 7.20: Comparação da Velocidade em Z, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota *k030*.

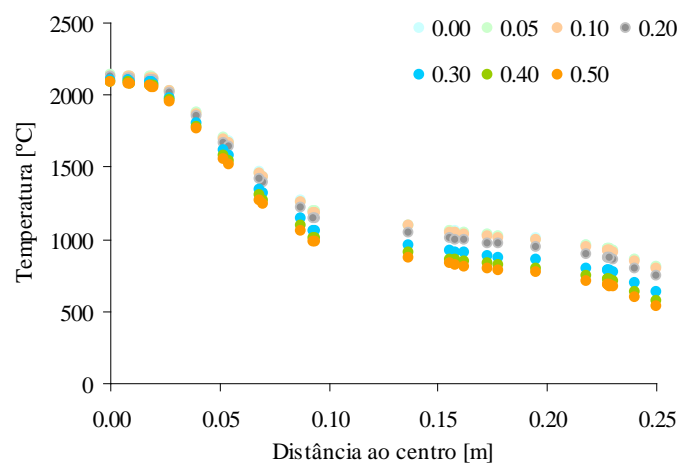
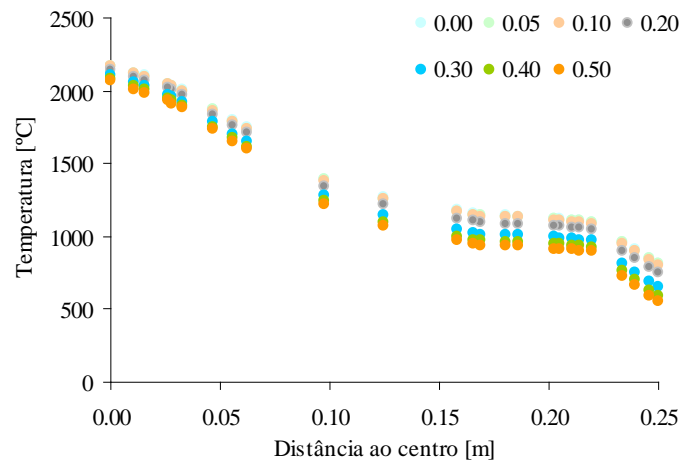
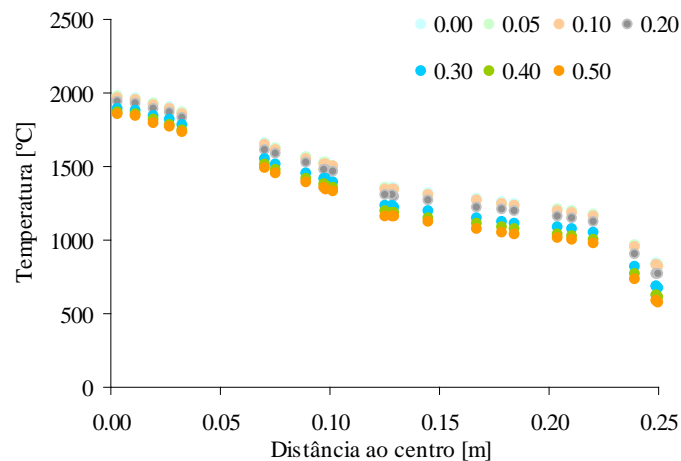


Figura 7.21: Comparação da temperatura máxima, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota *k015*.



*Figura 7.22:* Comparação da temperatura máxima, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota *k030*.



*Figura 7.23:* Comparação da temperatura máxima, em função da distância radial ao queimador, para diferentes emissividades externas, para a cota *k045*.

Para complementar o estudo anterior, mostra-se nas *Figuras 7.24 e 7.25* (para as espécies  $\text{CO}_2$  e  $\text{O}_2$ , respectivamente) que os perfis dos teores (em volume) das espécies estudadas não se alteram de forma significativa quando o parâmetro emissividade externa de radiação é modificado, o que permite concluir que as principais alterações dos perfis de temperatura ocorrem em zonas onde as reacções consideradas já estabilizaram.

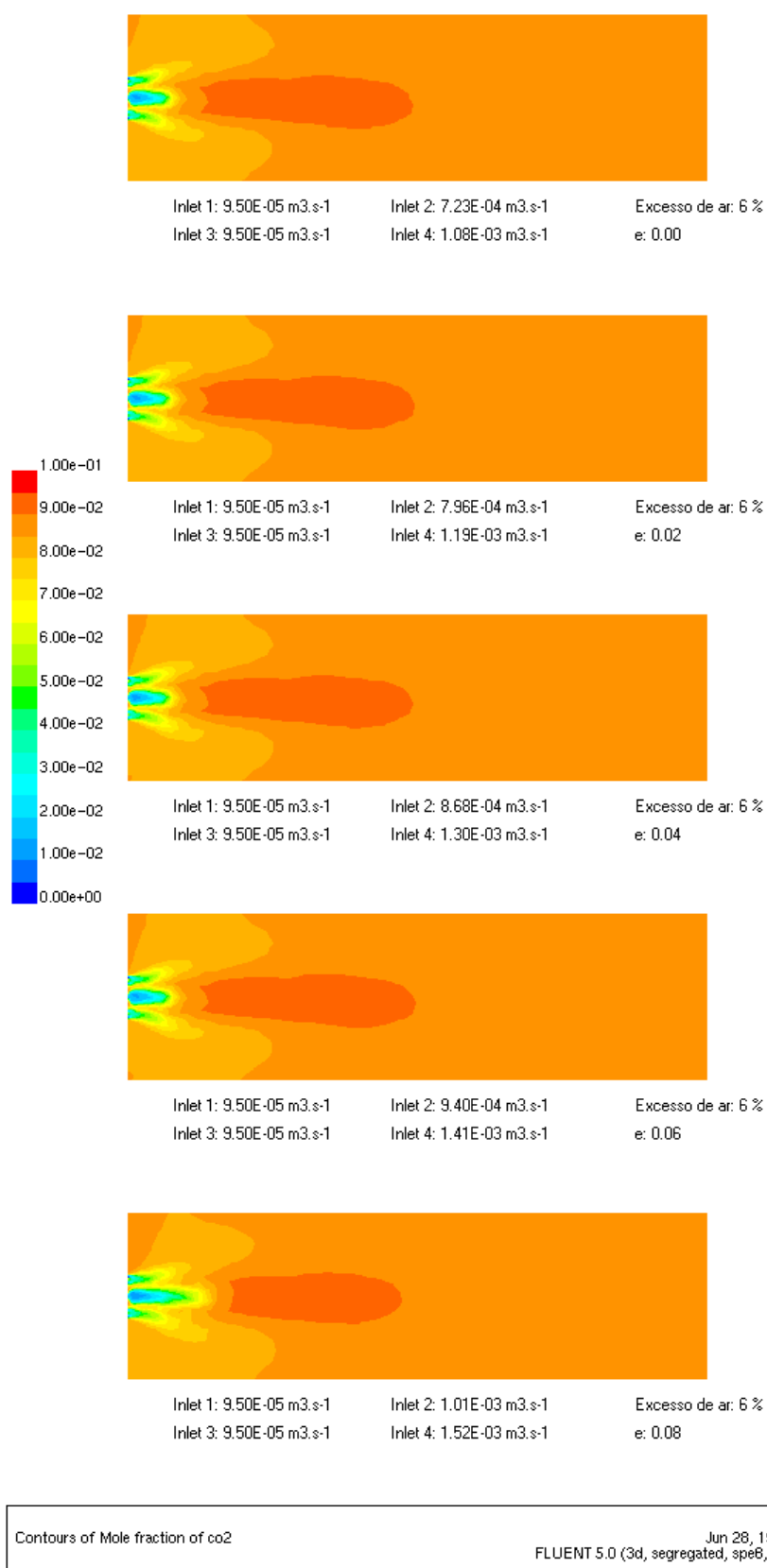


Figura 7.24: Fracção molar da espécie CO<sub>2</sub> para diferentes valores do parâmetro emissividade externa de radiação (0,00 a 0,08), corte longitudinal.



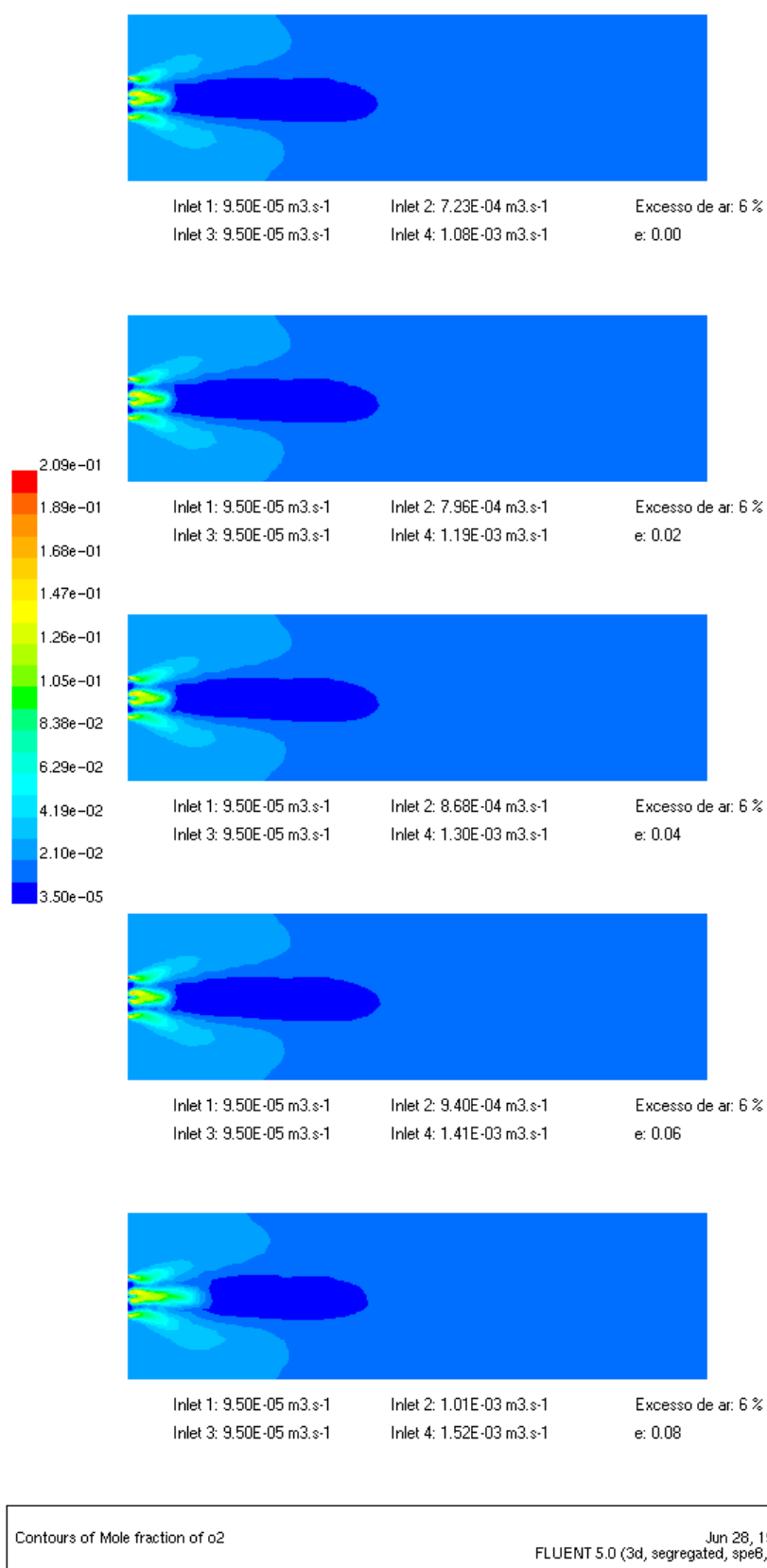


Figura 7.25: Fracção molar da espécie  $O_2$  para diferentes valores do parâmetro emissividade externa de radiação (0,00 a 0,08), corte longitudinal.

### 7.3 Sumário

Neste capítulo, considerou-se o estudo dos ensaios numéricos através da separação de propriedades, ou seja, foram realizados dois estudos distintos, um ao nível do balanço elementar e outro ao nível do balanço energético.

No que respeita ao balanço elementar, começou-se por realizar o estudo da proximidade entre os valores dos ensaios de validação, para as espécies  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ , e os resultados provenientes do modelo proposto. Verificou-se que a identificação dos valores obtidos nos ensaios de validação com os resultados provenientes do modelo proposto são bastantes satisfatórios, excepto para o caso do  $CO$  em que as principais diferenças se podem atribuir ao erro existente nas medições provenientes do analisador de gases utilizado para os ensaios de validação.

Ainda no estudo do balanço elementar, observa-se a influência do parâmetro emissividade externa de radiação, utilizado para a afinação do modelo, bem como os perfis das fracções molares para diferentes valores de excesso de ar, para todas as espécies, excepto o azoto.

Na segunda parte, respeitante ao balanço energético, considerou-se a possibilidade de afinar o modelo proposto através da variação de dois parâmetros. Os parâmetros considerados foram o coeficiente de absorção das espécies químicas que constituem os gases de combustão e a emissividade externa de radiação das paredes da fornalha.

Apresentam-se os resultados da variação dos parâmetros mencionados, onde se verifica que o parâmetro preponderante no modelo é a emissividade externa de radiação. Compara-se os resultados da variação deste parâmetro com os valores apurados nos ensaios de validação.

Por fim, mostra-se a variação da velocidade e temperatura do escoamento, no interior da câmara de combustão, bem como a variação elementar das espécies oxigénio e dióxido de carbono, para diferentes valores do parâmetro de emissividade, já mencionado.

---

# Capítulo VIII

## 8 Conclusões

O trabalho apresentado nesta tese consistiu numa tentativa de contribuição para caracterizar numericamente a combustão de um combustível gasoso, agora a entrar no mercado nacional, o gás natural, tendo como base um código computacional de dinâmica de fluidos. A realização deste trabalho permitiu obter as conclusões que seguidamente são apresentadas:

- i.) A utilização de códigos *CFD* para previsão de processos de combustão monofásica em fornalhas, é possível apesar das dificuldades que poderão surgir devido ao enorme esforço computacional necessário para realizar todas as variações que se poderão entender pertinentes. É de notar que o esforço computacional que este trabalho representa excede largamente as 10 000 horas de cálculo no processamento de mais de 5 Gbytes de informação;
- ii.) A construção de uma malha computacional de cálculo adequada ao equipamento em estudo e que tenha em consideração os perfis de escoamento nele existentes, é essencial à obtenção de resultados numéricos fisicamente correctos. Testes efectuados em malhas de menor dimensão mostraram a inadaptação dessas malhas a este tipo de simulações de escoamentos reactivos. A reticulação do domínio deverá garantir a não existência de transições bruscas das propriedades médias em células adjacentes;
- iii.) Uma correcta definição das propriedades e características do combustível tais como a composição elementar, poder calorífico, viscosidade, condutividade térmica e difusividade mássica, revelaram-se essenciais para a obtenção dos resultados aqui apresentados;

- iv.) Um dos factores que contribuiu para a proximidade dos valores calculados numericamente em relação aos valores obtidos nos ensaios de validação, foi a renormalização do caudal do comburente, tendo em consideração algumas não conformidades na estanqueidade da fornalha. Deste modo conclui-se que a simulação de processos de combustão necessita de uma correcta quantificação das condições de funcionamento dos equipamentos;
- v.) Os modelos de turbulência não demonstraram ter uma acção determinante nos contornos da combustão, ao contrário da sua influência em escoamento isotérmicos. As pequenas diferenças, em termos de perfil de velocidades, são atenuadas pelo aumento da temperatura dos gases de combustão. Sendo que, a composição dos gases, na chaminé, não varia em função do modelo de turbulência utilizado;
- vi.) O fenómeno de radiação no interior da fornalha reveste-se da maior importância nas zonas de combustão, afectando as distribuições internas de temperatura, as velocidades e a composição do escoamento. A utilização do *DTRM* como modelo de radiação tornou-se a solução mais eficiente para este tipo de situação. O número de direcções discretas de radiação é dependente da malha computacional e deverá ser adequado à geometria da fornalha;
- vii.) O modelo de combustão mais simples (*Modelo 1 – Mecanismo de passo único*) caracteriza-se por uma maior rapidez na obtenção de resultados. Os resultados, embora não se desviem significativamente do *Modelo 2*, excluem, à partida, a possibilidade de existência da espécie monóxido de carbono, quer como produto da reacção, quer como espécie intermédia e interveniente no processo de combustão;
- viii.) O modelo intermédio (*Modelo 2 – Mecanismo de duplo passo*), revelou-se adaptado a todas as condições de funcionamento da fornalha, produzindo previsões praticamente coincidentes com os valores experimentais. Embora a previsão do teor de monóxido de carbono nos gases de combustão seja, em todos os casos testados, inferior aos valores obtidos para validação, este é um problema que não se coloca para situações em que o excesso de ar da combustão se encontre acima dos 25 %, onde se pode considerar que não existe monóxido de carbono como mencionado no *Capítulo VI*;
- ix.) O modelo mais complexo (*Modelo 3 – Mecanismo de duplo passo multi-percursor*) revelou-se pouco adequado, visto que, apesar de utilizar um maior número de reacções para

caracterizar a combustão, as fracções molares quer do oxigénio quer do dióxido de carbono, presentes nos gases de combustão, atingem valores mais elevados que os valores obtidos pelos ensaios de validação. A inadequabilidade advém do esforço computacional exigido tendo em conta que os resultados não são mais satisfatórios;

- x.) A estimativa local do coeficiente de absorção dos gases, tendo como base os teores de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , revelou-se como um parâmetro não essencial, nesta situação, visto que a não utilização do modelo, que permite calcular este coeficiente, proposto (WSGGM), possibilitou a obtenção de resultados em maior conformidade com os valores de validação; e
- xi.) No caso estudado, o calor transferido para o exterior, através das paredes da fornalha, foi simulado com boa aproximação, após se considerar a existência de perdas por radiação, embora nestes casos, em que o fluxo de calor para o exterior é reduzido, torna-se uma boa alternativa, para simplificar os cálculos e reduzir o tempo computacional, considerar-se as perdas de energia apenas por convecção natural. Para obter os resultados mais próximos, no que respeita ao balanço energético, foi necessário testar diferentes valores para a emissividade das paredes da fornalha, o que envolveu uma quantidade bastante alargada de resultados;

### ***8.1 Contribuição da dissertação***

A contribuição mais importante desta dissertação é, talvez, uma maior sensibilização para as vantagens de uma abordagem numérica dos fenómenos em oposição a um pendor mais experimentalista. Não se trata, seguramente, de uma substituição mas de complementaridade entre técnicas. A utilização de modelos numéricos perfeitamente afinados para o fim em vista pode revestir-se de enorme importância económica no dimensionamento e optimização de equipamentos e sistemas de combustão. Este trabalho é uma abordagem preliminar demonstrativa da possibilidade de utilizar ferramentas numéricas capazes de prever com grande aproximação valores medidos experimentalmente, numa larga gama de condições operatórias.

Ficou, igualmente, demonstrado que é possível, fazendo uso dos mesmos princípios básicos, elaborar um modelo numérico de combustão cuja complexidade varia com a aproximação desejada aos valores de validação e com os meios disponíveis para a realização do trabalho, o que só foi possível devido a uma exaustiva caracterização das propriedades do combustível, quer em termos

químicos quer em termos físicos, e que permitiram identificar e quantificar as diversas etapas dos fenómenos estudados.

Outra contribuição, igualmente importante, situa-se ao nível da identificação dos parâmetros e variáveis com maior influência nesta situação particular de combustão de um combustível gasoso numa fornalha horizontal. Os resultados aqui apresentados poderão ser comparados com outros resultantes da aplicação de um modelo idêntico, mas com outro tipo de combustível gasoso, como seja o caso de gás natural de outra proveniência, logo com uma composição elementar diferente.

Por último importa referir a importância deste trabalho, pois foram poucas as vezes que, em Portugal, este código computacional foi utilizado na previsão de escoamentos com combustão em malhas tridimensionais, visto que até há bem pouco tempo, os meios necessários para a realização de um trabalho com o volume de informação tratada como este, não se encontravam disponíveis quer ao nível de postos de trabalho, quer ao nível de capacidade de processamento. As inúmeras dificuldades encontradas e a forma de as superar contribuíram para a criação de um conhecimento acrescido ao, anteriormente, existente nesta área.

## ***8.2 Sugestões para trabalho futuro***

A elaboração e tentativa de validação de um modelo numérico feita com base num conjunto de valores de validação tão limitado como o usado neste trabalho, envolve riscos elevados. Para se garantir a coincidência entre os resultados obtidos por via dos ensaios de validação e os obtidos por via do cálculo numérico, não basta existir concordância no valor de algumas variáveis lidas em determinado ponto. Torna-se necessária a realização de ensaios experimentais que contemplem a monitorização dos perfis de temperatura no interior da câmara de combustão e ao longo das paredes exteriores da fornalha, onde circula a água de arrefecimento, da fracção molar de combustível inqueimado e de vapor de água presentes nos gases de combustão, e a realização de ensaios com maior nível de estanqueidade, por forma a ser possível obter valores para validação em casos de excesso de ar próximo ou inferior ao estequiométrico, que forneçam um maior número de variáveis de confrontação. A realização de algumas destas tarefas estiveram nos objectivos iniciais deste trabalho, no entanto, por razões várias, não foi possível executá-las.

A introdução, nos modelos numéricos, de um módulo de previsão de poluentes é cada vez mais uma necessidade em sistemas de combustão. À semelhança de estudos efectuados para outros

combustíveis, seria interessante desenvolver um modelo de  $\text{NO}_x$  adaptado às características da combustão do combustível utilizado e que pudesse, de uma forma efectiva, de acordo com os respectivos ensaios para validação, prever a formação / destruição deste poluente, por forma a permitir a optimização de equipamentos e sistemas de combustão.

A utilização de códigos numéricos que envolvam o processamento de um volume de dados tão elevado como o que foi mencionado nas conclusões (*Secção 8*), não é compatível com os recursos computacionais, algo limitados, actualmente disponíveis. Esta imensa quantidade de resultados a analisar não permitiu, em tempo útil, efectuar testes exaustivos à independência dos modelos relativamente à malha de cálculo, o que, usualmente, se traduz na duplicação do número de células (cerca de 160 000 células), resolvendo-se alguns casos para confrontação de resultados. As tentativas efectuadas nunca permitiram que fosse possível a utilização de uma malha computacional de tal dimensão, visto o tempo envolvido para o cálculo de cada iteração alcançava cerca de 5 minutos, o que conduziu a nunca se ter atingido a convergência.

Um outro aspecto com relevância para a validação dos resultados prende-se com o teste do modelo numérico, em condições idênticas de combustão com o gás natural nacional, realizado em fornalhas com uma geometria diferente. Neste caso, será possível avaliar a aplicabilidade dos pressupostos de cada modelo de combustão aqui apresentado a equipamentos de diferentes características. Dado que as características geométricas da fornalha utilizada na obtenção dos valores de validação, foram concebidas de acordo com os conceitos inerentes a uma fornalha calorimétrica para ensaio de queimadores experimentais de combustíveis líquidos, seria interessante utilizar os modelos numéricos no dimensionamento de uma fornalha optimizada para o tipo de queimador utilizado neste trabalho. De igual forma, a aplicação e confrontação de resultados do modelo a sistemas de maiores dimensões é uma etapa de grande interesse económico. A possibilidade de optimização do funcionamento de grandes instalações com recurso a estas técnicas poderá ser a via para reduzir os custos de construção e teste de instalações piloto.

---

# *Referências bibliográficas*

Agouzoul, M., Reggio, M. e Camarero, R., (1988), “*A numerical study of turbulent flows using a nonstaggered grid*”, Computational Fluid Dynamics, Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland

“*Aide-mémoire de l'industrie du gaz*”, (1990), Quatrième édition, Association Technique de l'Industrie du Gaz en France, Paris

André, R.M.N., (1991), “*Yoko – Programa para aquisição de dados de uma fornalha calorimétrica*”, Departamento de Energias Convencionais, Laboratório Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial

Ar Líquido, (1998), Proposta nº 143/98 – AG/TL

Arai, N. e Hasatani, M., (1987), “*A mathematical model of simultaneous formation of volatile-NO and char-NO during the packed-bed combustion of coal-char particles under an NH<sub>3</sub>-O<sub>2</sub>-Ar gas stream*”, Fuel, Vol. 66, p. 1418-1426

Armfield, S.W. e Fletcher, C.A.J., (1988), “*Comparison of k-ε and algebraic Reynolds Stres Models for swirling diffuser flow*”, Computational Fluid Dynamics, Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland

Bakker, A., Fasano, J.B. e Leng, D.E., (1994), “*Pinpoint mixing problems with lasers and simulation software*”, Chemical Engineering, Vol. 101, No. 1, P. 94

Bird, R.B., Stewart, W.E. e Lightfoot, E.N., (1960), *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., New York

Burns, A.D., Clarke, D.S., Jones, I.P., Simcox, S. e Wilkes, N.S., ( ), “*Turbulent flow computations in complex geometries*”, Computational Fluid Dynamics, Elsevier Science Publishers B.V., North-Holland

Cabrita, I., (1994), “*Poluentes gerados por sistemas de combustão*”, Coaltec e Ambiente, Documentação interna.

Cabrita, I., (1996), “*Gás natural e ambiente*”, Seminário “Gás natural e aplicações”, INETI



- Chen, X.-Q. e Pereira, J.C.F., (1996), “*Computation of turbulent evaporating sprays with well-specified measurements: a sensitivity study on droplet properties*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 39, No. 3, pp. 441-454
- Chowdhury, R., Bhattacharya, P. e Chakravarty, M., (1994), “*Modelling and simulation of a downdraft rice husk gasifier*”, International Journal of Energy Research, Vol. 18, pp. 581-594
- Contimetra, (1998), Proposta nº 980175
- Coppalle, A. e Vervisch, P., (1983), “*The total emissivities of high-temperature flames*”, Combustion and flame, 49, pp. 101-108
- Cornea, S.M. e Smooke, M.D., (1990), “*NO<sub>x</sub> in parametrically varied methane flames*”, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 289
- Cumber, P.S., (1995), “*Improvements to the discret transfer method of calculating radiative heat transfer*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 38, No 12, pp. 2251-2258
- Denison, M. K. e Webb, B. W., (1993), “*A spectral line-based Weighted-Sum-of-Grey-Gases Model for arbitrary RTE solvers*”, Journal of Heat Transfer, Vol. 115, pp. 1004-1012
- Dryer, F.L. e Glassman, I., (1972), “*High-temperature oxidation of CO and CH<sub>4</sub>*”, Fourteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 987
- Edwards, D. K. e Matavosian, R., (1984), “*Scaling rules for total absorptivity and emissivity of gases*”, Journal of Heat Transfer, Vol. 106, pp. 684-689
- “*Encyclopédie des gaz*”, (1976) Elsevier - L'air liquide
- Fletcher, C.A.J., (1988), *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, Vol II, Springer-Verlag, Berlin
- “*Fluent User's Manual*”, (1996), version 4.3, Fluent Incorporated, Lebanon, USA
- Fouhy, K. e Parkinson, G., (1995), “*CPI design engineers go with the flow*”, Chemical Engineering, Vol. 102, No. 6, p. 28
- “*Gas Heat Capacity as a function of temperature*”, (1987), no endereço <ftp://ftp.kkassoc.com/kk-assoc/pub/gashc.zip>, encontrado na página “Thermophysical Data and Environments” com o endereço <http://www.csn.net/~takinfo/prop-top.htm>
- Greco, C., Yamane, E., Picciotti, G., Egea, M., Eston, N.E. e Silva, R.B., (1966), “*Manual de Termodinâmica e transmissão de calor*”, Departamento de Engenharia Mecânica, Escola Politécnica U. S. P., São Paulo
- Gulyurtlu, I., (1997), “*Inovações tecnológicas na utilização de gás natural*”, Departamento de Tecnologias de Combustão, Instituto Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial, Documentação interna

- Ha, M.Y. e Choi, B.R., (1994), “*A numerical study on the combustion of a single carbon particle entrained in a steady flow*”, Combustion and Flame, 97, pp 1-16
- Ha, M.Y. e Yavuzkurt, S., (1991), “*Combustion of a single carbon or char particle in the presence of high-intensity acoustic fields*”, Combustion and Flame, 86, pp 33-46
- Hayhurst, A.N., (1991), “*Does carbon monoxide burn inside a fluidized bed? A new model for the combustion of coal char particles in fluidized beds*”, Combustion and Flame, 85, pp 155-168
- Horiba, (1992), “*Gas Emission Analyzer System CMA-3X1A Series Instruction Manual*”, Kyoto, Japan
- Jaberg, H. e Algermissen, J., (1988), “*Numerical Navier-Stokes analysis of the reacting process in a cone probe flow*”, Computational Fluid Dynamics, Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland
- Dick, J., (1995), “*Modeling software targets restricted flow*”, Chemical Engineering, Vol. 102, No. 5, p. 133
- Kuo, K.K., (1986), *Principles of combustion*, John Wiley & Sons, New York
- Lallement, N., Sayre, A. e Weber, R., (1996), “*Evaluation of emissivity correlations for  $H_2O$ - $CO_2$ - $N_2$ /air mixtures and coupling with solution methods of the radiative transfer equation*”, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 22, pp. 543-574
- Liu, F., Garbett, E.S. e Swithenbank, J., (1992), “*Effects of anisotropic scattering on radiative heat transfer using the P1-approximation*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 35, No 10, pp. 2491-2499
- Lockwood, F.C. e Shah, N.G., (1981), “*A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures*”, Eighteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 1405
- Mesynger, C. e Farouk, B., (1996), “*Turbulent natural convection-nongray gas radiation analysis in a square enclosure*”, Numerical Heat Transfer, Part A, 29:671-687
- Miller, J.W., Schorr, G.R. e Yaws, C.L., (1976†), “*Viscosity of gas*”, Chemical Engineering, Vol. 83, No. 25, pp.155-157
- Miller, J.W., Shah, P.N. e Yaws, C.L., (1976†), “*Thermal conductivity of gas*”, Chemical Engineering, Vol. 83, No. 25, pp.153-155
- Modest, M. F., (1991), “*The Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for arbitrary solution methods in radiative transfer*”, Journal of Heat Transfer, Vol. 113, pp. 650-656
- Monteiro, A.P., (1989), “*Balances de massa e energia da combustão, programa Comb*”, Departamento de Energia Convencionais, Laboratório Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial

- Morel, R., Laassibi, A., Alcaraz, E., Zegadi, R., Brun, G. e Jeandel, D., (1992), “*Validation of a  $k$ - $\epsilon$  model based on experimental results in a thermally stable stratified turbulent boundary layer*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 35, No 10, pp. 2717-2724
- Neves, A. B., Franco, C. L. e Silva, J. B., (1986), “*Curso de conservação de energia*”, Departamento de Energias Convencionais, LNETI
- Park., H.M., Ahluwalia, R.K. e Im, K.H., (1993), “*Three-dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering media using the modified differential approximation*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 36, No 5, pp. 1181-1189
- Paterson, D.A. e Apelt, C.J., (1988), “*Wind flows around buildings*”, Computational Fluid Dynamics, Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland
- Peeters, T.W.J. e Henkes, R.A.W.M., (1992), “*The Reynolds-stress model of turbulence applied to the natural-convection boundary layer along a heated vertical plane*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 35, No 2, pp. 403-420
- Perry, R.H. e Green, D., (1984), “*Perry's chemical engineers' handbook*”, McGraw-Hill Book Co, Singapore
- Polifke, W., Dobbeling, K., Winkler, D., Sattelmayer, Th., Nicol, D.G. e Malte, P.C., (1994), “*A model of  $NO_x$  formation in a lean-premixed combustion*”, Fluent User's Group Meeting, Fluent Europe, Sheffield, UK
- Quirk, R. e Norman, D., (1998), “*The three R's of  $NO_x$  control*”, Natural gas utilization in the glass industry conference
- Reid, R.C., Prausnitz, J.M. e Poling, B.E., (1987), *The properties of gases & liquids*, McGraw-Hill Book Company, 4<sup>th</sup> Edition, New York
- Método de Chung et al. (thermal conductivity), pp 504
- Método de Chung et al. (viscosity), pp 396
- Método de Fuller et al. (diffusion), pp 587
- Método de Toy e Thodos (thermal conductivity), pp 498
- Método de Wilke e Lee (diffusion), pp 587
- Método do potencial 12-6 de Lennard-Jones (diffusion), pp 582
- Roca, J., (1998), “*Advantages of natural gas utilization in the glass industry*”, Natural gas utilization in the glass industry conference
- Rohsenow, W.M. e Hartnett, J.P., (1973), *Handbook of heat transfer*, McGraw-Hill, New York
- Russell, J. B., (1981), *Química Geral*, McGraw-Hill, Brazil
- Shafey, H.M., El-Ghany, A.M.A. e Nassib, A.M., (1993), “*An analysis of the combined conductive-radiative heat transfer between a surface and a gas-fluidized bed at high temperature*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 36, No 9, pp. 2281-2292
- Smith, T. F., Shen, Z. F. e Friedman, J. N., (1982), “*Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model*”, Journal of Heat Transfer, Vol. 104, pp. 602-608

Soloukhin, R.I., (1984), *Radiative heat transfer in high-temperature gases*, Hemisphere Publishing Corporation, Springer-Verlag, Berlin

“*Tecnologias da combustão do gás natural na indústria do vidro*”, (1998), Acção pelo Programa THERMIE, Comissão Europeia- DG XVII da Energia

Transgás, Folheto de divulgação

Trindade, T., (1996), “*Modelação de escoamento e combustão de biomassa em fornalhas ciclónicas*”, MsThesis, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Lisboa

Vandaveer, F.E., (1965), *Gas Engineers Handbook*, 1<sup>st</sup> Edition, Chapter 2, “Gaseous Fuels”, Industrial Press Inc., New York

Westbrook, C.K. e Dryer, F.L., (1981), “*Simplified Mechanisms of the oxidation of hydrocarbon fuels in flames*”, Combustion Science and Technology, Vol 27, pp 31-43

Whitaker, S., (1977), “*Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media: a theory of drying*”, Advances in heat transfer, Vol. 13, pp. 119, Academic Press, New York

Yamamoto, S., Daiguji, H. e Ishigaki, H., (1988), “*An implicit time-marching scheme for solving the compressible Navier-Stokes equations*”, Computational Fluid Dynamics, Elsevier Science Publishers B. V., North-Holland

Yaws, C. L., Borreson, R. W. e Schorr, G. R., (1976), “*Correlation constants for chemical compounds – Heat capacities of gas*”, Chemical Engineering, August 16, pp. 79-83

Zimmermann, G. e Muller, U., (1992), “*Benard convection in a two-component system with Soret effect*”, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 35, No 9, pp. 2245-2256