

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE PROCESSOS DE COMBUSTÃO DE GÁS NATURAL EM CÂMARAS CILÍNDRICAS USANDO O MODELO SCRS

Cristiano V. da Silva.

Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica – PROMEC – Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS.
Rua Sarmento Leite, 425, 90050-170 - Porto Alegre, RS, Brasil
crisvitor007@yahoo.com.br

Horácio A. Vielmo.

Departamento de Engenharia Mecânica – Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS.
Rua Sarmento Leite, 425, 90050-170 - Porto Alegre, RS, Brasil.
vielmo@meccanica.ufrgs.br

Francis H. R. França.

Departamento de Engenharia Mecânica – Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS.
Rua Sarmento Leite, 425, 90050-170 - Porto Alegre, RS, Brasil.
frfranca@meccanica.ufrgs.br

Resumo. O presente trabalho apresenta os resultados da simulação numérica do processo de combustão em uma câmara cilíndrica axissimétrica de paredes adiabáticas. O processo de combustão é resolvido para condição de estequiometria. Utiliza-se o gás natural como combustível, e o ar atmosférico como oxidante. A simulação é executada com processo de combustão não estagiada, sem pré-mistura, onde o gás natural é injetado por um duto circular central, e o ar atmosférico por um orifício anular externo à esse duto, no mesmo plano. São resolvidas as equações de conservação de massa, energia, quantidade de movimento e espécies químicas. A radiação térmica no interior da câmara é modelada através do método das zonas, o $k-\varepsilon$ é o modelo de turbulência adotado, e o processo de combustão é descrito através do modelo SCRS – “Simple Chemically-Reacting Systems”. Para a solução das equações diferenciais faz-se o uso do Método dos Volumes Finitos. Os resultados da modelagem matemática permitem determinar o perfil da zona de combustão, a distribuição de concentrações de espécies químicas, além do campo de velocidades. O perfil de temperaturas é de extrema importância para prever a performance da câmara de combustão, assim como auxiliar na sua otimização. Os resultados são comparados com dados experimentais obtidos na literatura.

Palavras Chave. Combustão, $k-\varepsilon$, SCRS, Método das Zonas, Volumes Finitos.

1. Introdução

O entendimento de processos de combustão em câmaras é uma importante ferramenta para o entendimento otimização da queima. No sentido de avaliar o escoamento e a transferência de calor no interior de equipamentos industriais como fornos, câmaras de combustão, incineradores, etc., e ainda para otimização de projetos desses equipamentos a simulação numérica pode ser uma boa alternativa. Atualmente a tecnologia de modelamento da combustão pode assumir muitas formas, mas poucas possuem a capacidade de representar de maneira realística os processos de combustão. Sendo assim, uma melhor modelagem desse fenômeno é de grande importância para o desenvolvimento de ferramentas numéricas mais eficientes. Eaton et al. (1999) apresentam uma revisão de modelos aproximados de processos de combustão capazes de simular esses fenômenos. Os modelos apresentados estão baseados fundamentalmente nas equações de conservação de massa, energia, espécies químicas e quantidade de movimento, acopladas a modelos de turbulência do tipo $k-\varepsilon$ (Launder e Spalding, 1972; Launder e Sharma, 1974), assim como modelos de combustão baseados nas leis de Arrhenius (Kuo, 1986; Fluent, 1997), modelos de Magnussen – EBU – “Eddy Breakup” (Magnussen e Hjertager, 1976), e modelos de transferência de calor por radiação do tipo RTE – “Radiative Transfer Equation” (Özisik, 1985; Carvalho et al., 1991).

Em um estudo numérico e experimental, Magel et al. (1996-a) investigaram o processo de combustão de gás natural em uma câmara de combustão cilíndrica axissimétrica, com um único queimador de 400 kW situado sobre a linha de simetria da câmara. Foi utilizado o modelo de combustão baseados no EDC - “Eddy Dissipation Concept”, acoplado ao modelo de turbulência $k-\varepsilon$. Magel et al. (1996-a) obtiveram perfis de temperatura, concentrações de oxigênio, monóxido de carbono e dióxido de carbono, para várias posições de interesse no interior da câmara de combustão. Em outro trabalho, Magel et al. (1996-b) fazem um estudo numérico do processo de combustão turbulenta no interior de uma câmara de combustão cilíndrica com a mesma geometria e potência do queimador utilizada no trabalho anterior. Nesse trabalho Magel et al. (1996-b) realizam uma simulação detalhada do mecanismo de reação química para um processo de combustão turbulenta sem pré-mistura. A Radiação térmica foi considerada através do modelo de ordenadas discretas, assumindo coeficiente de absorção do gás igual a $0,5 \text{ m}^{-1}$. Dentre os resultados obtidos estão os perfis de temperatura, concentrações de oxigênio, monóxido de carbono e dióxido de carbono para várias posições de interesse no interior da câmara de combustão, além da concentração de NOx, obtidos com rotinas de pós processamento.

Nieckele et al. (1999-a) apresentaram os resultados de uma análise de processos de oxidação em um forno industrial para refusão de alumínio através de simulação numérica usando o FLUENT (Fluent, 1997). Nesse trabalho, o modelo adotado para simular o escoamento turbulento foi o $k-\epsilon$. Para a descrição da combustão fizeram o uso das Leis de Arrhenius e do modelo Magnussen, utilizando para modelar a transferência de calor por radiação o modelo DTRM - "Discrete Transfer Radiation Model" (Carvalho et al., 1991; Fluent, 1997).

Nieckele et al. (2001) realizaram uma análise numérica envolvendo processos de combustão em uma câmara cilíndrica, novamente usando o FLUENT, na qual dados experimentais de Magel et al. (1996-a) foram comparados com a simulação. Dentre os modelos de combustão utilizados pode-se citar os de taxas finitas generalizadas, tais como os de Magnussen e Arrhenius, e os chamados PDFs - "Probability Density Functions" (Kuo, 1986; Fluent, 1997). Foi mostrado que o modelo de combustão que mais se aproximou dos dados experimentais foi o combinado Arrhenius-Magnussen, obtendo excelente concordância com os resultados experimentais. Na seqüência deste trabalho, Nieckele et al. (2002), desenvolveram um estudo numérico sobre a mesma geometria do trabalho anterior, utilizando o modelo de Arrhenius e Magnussen, porém analisando duas situações para o processo de combustão. Na primeira situação foi utilizado uma única reação global para prever a queima do combustível, e na segunda foi considerada uma reação em duas etapas. Os resultados obtidos foram também comparados com dados experimentais de Magel et al. (1996-a), obtendo boa concordância, sendo que o caso com duas etapas apresentou os melhores resultados, muito próximos dos valores experimentais.

O presente trabalho apresenta a simulação numérica do processo de combustão não estagiada da mistura de ar e combustível sem pré-misturada no interior de uma câmara cilíndrica. Foi utilizando o modelo de reações químicas simplificadas SCRS - "Simple Chemically-Reacting Systems" (Spalding, 1979), acoplado ao modelo turbulência $k-\epsilon$. A transferência de calor por radiação foi avaliada pelo método das zonas (Hottel e Sarofim, 1967, Siegel e Howell, 2002). O objetivo principal foi analisar o comportamento do processo de combustão de gás natural, visando verificar a aplicabilidade do SCRS, por tratar-se de um modelo relativamente simples e fácil de implementar, podendo vir a apresentar uma boa relação custo-benefício computacional.

Em investigações anteriores verificou-se o comportamento do SCRS na ausência de equações de transferência de calor por radiação (da Silva e Vielmo, 2003.) Os resultados obtidos nesse trabalho foram comparados com dados experimentais de Magel et al. (1996-a) e Magel et al. (1996-b), sendo discutida a sua conveniência.

2. Formulação matemática

Considera-se que o processo de combustão ocorra instantaneamente, e que as trocas térmicas já tenham atingido o regime permanente. Sabendo que a transferência de calor ocorre dos gases quentes oriundos da combustão para o exterior da câmara, o foco do presente trabalho é inicialmente analisar o comportamento do processo com relação à transferência de calor, às concentrações dos componentes da mistura, e características da chama e do escoamento no interior da câmara de combustão. O problema consiste em: dada a geometria da câmara, calcular a distribuição de temperaturas, concentrações, e também o campo de velocidades. Foram adotadas equações médias no tempo, e o modelo $k-\epsilon$ simula a turbulência presente no escoamento através do cálculo de uma viscosidade turbulenta μ_t , uma propriedade do escoamento. A transferência de calor por radiação é calculada através do método das zonas, sendo as áreas de troca direta determinadas pelas equações integrais desenvolvidas por Sika (1991), e coeficiente de absorção do gás constante e igual $0,5 \text{ m}^{-1}$.

2.1. Equações do movimento

2.1.1. Conservação da massa

Adotando o sistema de coordenadas cilíndricas, e a existência de axissimetria,

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho \bar{v}) + \frac{\rho \bar{v}}{r} = 0 \quad (1)$$

sendo x e r as coordenadas axial e radial, \bar{u} e \bar{v} as velocidades médias nestas direções, respectivamente, e ρ a massa específica.

2.1.2. Conservação de quantidade de movimento na direção axial (\bar{u})

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\rho \bar{u}) = -\frac{\partial p^*}{\partial x} + \bar{\nabla} \cdot ((\mu + \mu_t) \bar{\nabla} \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \quad (2)$$

onde μ é a viscosidade absoluta, μ_t a viscosidade turbulenta, definida como $\mu_t = C_\mu \rho k^2 / \varepsilon$, $p^* = \bar{p} - (2/3)k$ é a pressão modificada, C_μ uma constante empírica do modelo de turbulência, \bar{p} a pressão média, k a energia cinética turbulenta e ε a sua dissipação.

2.1.3. Conservação de quantidade de movimento na direção radial (\bar{v})

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{v}) = -\frac{\partial p^*}{\partial r} + \bar{\nabla} \cdot \left((\mu + \mu_t) \bar{\nabla} \bar{v} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r} \quad (3)$$

2.2. Modelo de turbulência $k - \varepsilon$

2.2.1. Conservação de energia cinética turbulenta k e sua dissipação ε

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho k) = \bar{\nabla} \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \bar{\nabla} k \right) + P_k - \rho \varepsilon \quad (5)$$

e

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \varepsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \varepsilon) = \bar{\nabla} \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \bar{\nabla} \varepsilon \right) + C_{1,\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (6)$$

onde $C_{1,\varepsilon}$ e $C_{2,\varepsilon}$ são constantes empíricas do modelo de turbulência, σ_k e σ_ε representam os respectivos números de Prandtl da energia cinética turbulenta e sua dissipação, e P_k a produção ou dissipação de energia cinética turbulenta, definida como

$$P_k = \mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \quad (7)$$

2.3. Modelo de combustão SCRS

2.3.1. Conservação de espécies químicas

O modelo de reações químicas simplificadas assume que a reação de combustão ocorra de forma instantânea, e que oxigênio e combustível não coexistem. Apenas três espécies químicas estão presentes na mistura: oxigênio, combustível e produtos. É necessária uma equação de conservação para cada uma dessas espécies. Entretanto, sabendo que em escoamentos turbulentos a difusão de espécies químicas devido à turbulência é dominante sobre a difusão molecular, adota-se como boa aproximação que os coeficientes de difusividade mássica dessas espécies químicas sejam idênticos (Spalding, 1979). Deste modo uma única equação de conservação necessita ser resolvida. Como o SCRS assume que combustível e oxidante formam uma única reação química, sendo o resultado desta reação assumido como produtos, e com a introdução de uma variável auxiliar de cálculo, f_{fx} , tem-se a seguinte equação de conservação para as espécies químicas

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho f_{fx}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho f_{fx}) = \bar{\nabla} \cdot \left(\left(\rho D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \bar{\nabla} f_{fx} \right) \quad (8)$$

onde D é a difusividade mássica, e Sc_t é o número de Schmidt turbulento. A variável f_{fx} é localmente tratada no domínio de cálculo como $f_{fx} = f_{comb} - (f_{ox} / s)$, onde f_{comb} e f_{ox} são as respectivas frações de combustível e oxigênio, e s é a relação estequiométrica entre as suas massas. Deste modo, analisando o sinal de f_{fx} é possível identificar a região rica em combustível ou rica em oxigênio. Quando f_{fx} for maior que zero tem-se uma região rica em combustível, e quando f_{fx} for menor que zero tem-se uma região rica em oxigênio. O modelo ilustra este fato da seguinte forma:

$$f_{fx} > 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} f_{ox} = 0 \\ f_{comb} = f_{fx} \end{array} \right\} \quad (9)$$

e

$$f_{\bar{x}} < 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} f_{comb} = 0 \\ f_{ox} = -sf_{\bar{x}} \end{array} \right\} \quad (10)$$

2.3.2. Conservação de energia

Para o transporte de energia devido ao escoamento dos fluidos no interior da câmara, desprezando a parcela referente ao transporte de energia devido à difusão de cada espécie, tem-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{h}) = \bar{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{\kappa}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \bar{\nabla} \bar{h} \right) + \bar{S}_{rad} \quad (11)$$

onde $\bar{h} = \overline{c_p T + H^{comb} f_{comb}}$ é a entalpia média da mistura e c_p o seu calor específico, definido como $c_p = \sum_{\alpha} f_{\alpha} c_{p,\alpha}$, sendo $c_{p,\alpha}$ e f_{α} o calor específico e a fração mássica da α -ésima espécie química. T é a temperatura, H^{comb} a entalpia de combustão, κ a condutividade térmica da mistura, Pr_t o número de Prandtl turbulento, e \bar{S}_{rad} o termo fonte devido à transferência de calor por radiação.

Completando o modelo, pode-se determinar a massa específica da mistura através da equação de estado de gás perfeito (Kuo, 1986, Spalding, 1979; Fluent, 1997), $\rho = p \overline{MM} (\overline{RT})^{-1}$, onde, p é a pressão de operação da câmara, que nessa equação é assumida como sendo 1 atm (Spalding, 1979), \overline{MM} é a massa molecular da mistura, e \overline{R} é a constante universal dos gases.

Todas as equações até aqui apresentadas são válidas apenas no núcleo turbulento, onde $\mu_t \gg \mu$. Próximo às paredes sólidas, onde $\mu_t \ll \mu$, a lei da parede recomendada por Freire et al. (2002) é utilizada. A lei da parede é obtida assumindo equilíbrio turbulento nas regiões próximas às superfícies sólidas. Deve ser aplicada na região entre a parede e o primeiro ponto nodal da simulação. Essa lei consiste em prescrever um perfil de velocidade logarítmico na região totalmente turbulenta e um perfil linear na sub-camada laminar. Sendo assim, para $y^+ \leq 11,5 \rightarrow u^+ = y^+$, e $y^+ > 11,5 \rightarrow u^+ = (1/A) \ln(y^+) + \Psi$, onde $y^+ = y \left(\rho C_{\mu}^{1/4} k^2 \mu^{-1} \right)$ é a distância adimensional normal à parede, $u^+ = \bar{u} / u^*$

é a velocidade adimensional, $u^* = \sqrt{\tau_w / \rho}$ é a velocidade de atrito, onde τ_w é a tensão de cisalhamento na parede, e y é a distância normal à parede. Segundo Nikuradse (1933), as constantes A e Ψ , que aparecem na equação de u^* , possuem o valor de 0,4 e 5,5, respectivamente.

De acordo com a hipótese de equilíbrio entre a produção e destruição de energia cinética turbulenta, considerando-se ainda que a tensão de cisalhamento na parede é aproximadamente constante nessa região, prescreve-se gradiente normal de energia cinética nulo nas paredes. A dissipação de energia cinética turbulenta é determinada pela expressão $\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} k^{3/2} (Ay)^{-1}$.

Para a determinação do termo fonte devido à radiação térmica presente no processo de combustão, faz-se o uso do método das zonas (Hottel e Sarofim, 1967, Siegel e Howell, 2002), que divide o domínio de cálculo em zonas de gás e de superfície com temperatura constante. Como na combustão de gás combustível a presença de particulados é desprezível, pode-se assumir com boa precisão que o meio não espalha energia, embora emita e absorva radiação térmica. Assume-se também que o coeficiente de absorção do gás, a , é constante e igual a $0,5 \text{ m}^{-1}$. Deste modo, fazendo um balanço de energia radiante sobre cada zona de gás tem-se, em potência na unidade de volume, W/m^3 ,

$$\bar{S}_{rad,\gamma} = -\frac{1}{V_{\gamma}} \left(4V_{\gamma} a \sigma T_{\gamma}^4 - \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} \overline{g_{\gamma^*} g_{\gamma}} \sigma T_{\gamma^*}^4 - \sum_{j=1}^J \overline{s_j g_{\gamma}} q_{o,j} \right) \quad (12)$$

onde, no lado direito, o primeiro termo entre parênteses representa a quantidade de energia emitida por radiação pela zona de volume V_{γ} , o segundo termo representa a quantidade de energia radiante absorvida por esta zona, oriunda das outras zonas de volume V_{γ^*} , e o terceiro termo representa a quantidade de energia radiante absorvida pela zona de volume V_{γ} , oriunda das zonas de superfície j . O termo σ representa a constante de Stefan-Boltzmann, $\overline{g_{\gamma^*} g_{\gamma}}$ e $\overline{s_j g_{\gamma}}$ são as área de troca direta entre zonas de gás, e entre zonas de gás-superfície, respectivamente. $q_{o,j}$ é a

radiosidade da superfície j . Fazendo da mesma forma, para as zonas de superfície A_k , tem-se, em potência na unidade de área, W/m^2 ,

$$\bar{S}_{rad,k} = \frac{1}{A_k} \left(\sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \bar{g}_{\gamma} s_k \sigma T_{\gamma}^4 + \sum_{j=1}^J \bar{s}_j s_k q_{o,j} \right) - q_{o,k} \quad (13)$$

onde no lado direito o primeiro termo entre parênteses representa a energia emitida por radiação pela zona de volume V_{γ} , e que incide na zona de superfície k , o segundo a energia por radiação que parte da zona de superfície j e incide na zona de superfície k , e o termo $q_{o,k}$ representa a radiosidade da superfície k . $\bar{g}_{\gamma} s_k$ e $\bar{s}_j s_k$ são as áreas de troca direta entre zonas de gás-superfície e superfície-superfície. As áreas de troca direta são determinadas através das expressões desenvolvidas por Sika (1991).

3. Problema físico

A geometria analisada é baseada no estudo numérico e experimental de Magel et al. (1996-b). Considera-se uma câmara de combustão cilíndrica de 1,7 m de comprimento e 50 cm de diâmetro, conforme mostra a Fig. 1. Esta geometria é a mesma usada por Garreton e Simonin (1994) em seus experimentos. A câmara de combustão é alimentada através do bico injetor de um queimador de 400 kW situado na sua linha de simetria axial. Gás natural foi utilizado como combustível, com 90% de metano e 10% de nitrogênio.

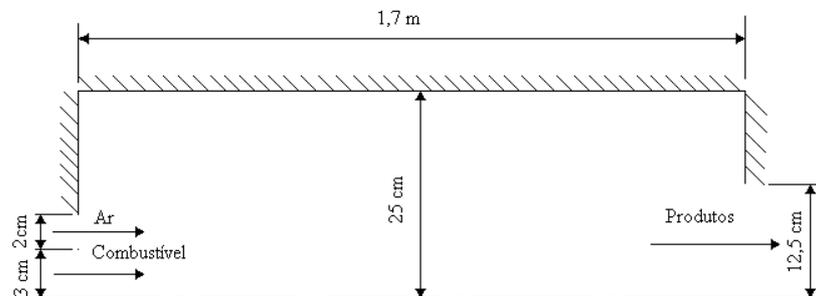


Figura 1. Geometria da câmara de combustão.

Considerando a axissimetria do problema, assume-se o domínio de cálculo como sendo apenas uma fração angular representativa da câmara (1 radiano). Assume-se também que o nitrogênio presente na reação se mantém inerte. A composição mássica do ar seco é de 23,15 % de oxigênio e 76,85 % de nitrogênio. Assume-se que o combustível entra por um duto central na temperatura de 313,15 K e velocidade de 6,71 m/s, e o oxidante por um orifício anular, externo a esse duto, no mesmo plano, na temperatura de 323,15 K e velocidade de 10,50 m/s.

Considera-se ainda que o principal componente dos produtos seja o nitrogênio, já que o mesmo existe em maior proporção. Logo a mistura antes da combustão será metano, oxigênio e nitrogênio. Para fins de modelamento assume-se que, tanto o combustível como o ar sejam inicialmente injetados com velocidade e temperatura constantes, sendo a mistura levemente enriquecida, utilizando-se um excesso de combustível de 4%. Despreza-se as forças de empuxo devido à variação da massa específica, pelo fato da advecção ser dominante.

Embora haja uma pequena perda de calor para ambiente, esta é desprezível em comparação com o calor gerado no processo de combustão. Deste modo assume-se que a fornalha tenha paredes adiabáticas.

4. Propriedades termofísicas

As constantes presentes nas equações e propriedades termofísicas dos gases envolvidos foram compiladas de várias fontes, e estão apresentadas na Tab. 1. Considera-se que todas as propriedades termofísicas sejam mantidas constantes, para cada substância, com exceção do calor específico dos gases (CH_4 , O_2 e N_2). Sendo assim, pode-se verificar na Tab. 2 os valores do calor específico a pressão constante como função da temperatura. O calor específico da mistura foi obtido a partir de uma média ponderada nas frações em massa de cada espécie. Para a mistura faz-se o uso das propriedades termofísicas do ar, pelo fato deste se apresentar proporcionalmente em maior quantidade.

Tabela 1. Propriedades termofísicas usadas na solução do problema (diversas fontes).

Propriedades	Magnitude	Propriedades	Magnitude
\overline{MM}_{N_2} (kg/kmol)	28	\overline{MM}_{CH_4} (kg/kmol)	16
Pr_t (-)	0,9	\overline{MM}_{O_2} (kg/kmol)	32

σ (W/m ² K ⁴)	$5,6697 \times 10^{-8}$	μ (Ns/m ²)	$2,97 \times 10^{-5}$
κ (W/mK)	$45,4 \times 10^{-3}$	D (m ² /s)	$2,88 \times 10^{-5}$
\bar{R} (kJ/kmolK)	8,3145	Sc_t (-)	0,9
H^{comb} (J/kg)	$3,4 \times 10^7$	σ_ϵ (-)	1,3
$C_{2,\epsilon}$ (-)	1,92	σ_k (-)	1,0
$C_{1,\epsilon}$ (-)	1,44	C_μ (-)	0,09

Tabela 2. Calor específico à pressão constante como função da temperatura (Van Wylen et al., 1998).

Temperatura (K)	c_{p,CH_4} (J/kgK)	c_{p,O_2} (J/kgK)	c_{p,N_2} (J/kgK)
300	2226	914	1045
600	3256	1005	1075
1000	4475	1084	1164
1500	5408	1360	1239
2000	5904	1175	1283
2500	6165	1215	1314

5. Condições de contorno

As paredes da câmara de combustão são adiabáticas. Nelas considerou-se a condição de não deslizamento (velocidade nula) e impermeabilidade. No eixo de simetria assumiu-se nulo o gradiente radial da velocidade axial, e nula a velocidade radial. A condição de saída para todas as variáveis foi de fluxo difusivo nulo, sendo a componente axial da velocidade, a jusante da saída da câmara, corrigida por um fator afim de conservar a massa e evitar contrafluxos. Em todo o plano de saída a componente radial da velocidade é nula.

Na seção de entrada considerou-se escoamento uniforme na direção axial, com perfil de concentração também uniforme, em cada região de entrada. Considerou-se a energia cinética turbulenta $k = \frac{3}{2}(u_{in}I)^2$, onde I é a intensidade de turbulência. Para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta especificou-se $\epsilon = C_\mu^{3/4}k^{3/2}/l$, onde l é o comprimento característico da escala de turbulência.

A intensidade de turbulência na entrada foi prescrita, igual a 2% para o oxidante e 1% para o combustível. Para a dissipação da energia cinética turbulenta prescreveu-se o comprimento característico, igual a 0,02 m para o oxidante e 0,03 m para o combustível.

6. Método numérico

A solução numérica das equações de conservação foi obtida numericamente através do Método dos Volumes Finitos, conforme descrito por Patankar (1980). O esquema Power-Law foi selecionado para avaliar os fluxos nas faces dos volumes de controle. O acoplamento pressão-velocidade foi resolvido através do algoritmo SIMPLE. O sistema de equações algébricas obtido foi resolvido usando o TDMA, fazendo o uso da técnica de correção em bloco, com exceção da energia cinética turbulenta e sua dissipação.

Devido ao forte acoplamento entre as equações e às não linearidades, são empregadas sub-relaxações iguais a 0,1 para todas as equações, e 0,01 para o termo fonte de radiação, afim de evitar a divergência da solução. Foram realizados testes de independência de malha, chegando-se a 60 volumes na direção axial, e 30 volumes na direção radial. Esta malha possibilitou um bom comportamento entre a qualidade da solução e o tempo computacional. Os termos fonte das equações de conservação foram linearizados, e quando necessário discretizados em diferenças finitas.

O termo fonte de radiação foi resolvido separadamente em uma subrotina, que utilizou dados da malha para cálculo das áreas de troca direta, e temperatura da iteração anterior. As radiosidades foram determinadas através de um cálculo iterativo dentro desta subrotina.

O cálculo da variação do calor específico com a temperatura apresentado na Tab. 2 foi feito utilizando-se as equações integrais apresentadas em Van Wylen et al. (1998).

O tempo computacional requerido para a solução de cada caso, em um PC, foi de algumas horas, sendo que a solução era considerada convergida quando o somatório dos resíduos normalizados de todas as equações era inferior a 10^{-9} , e o resíduo normalizado da entalpia era inferior a 10^{-7} .

7. Análise dos resultados

A Figura 2-a apresenta a distribuição de temperatura dos gases dentro da câmara de combustão. Pode-se verificar nessa figura que existem regiões bastante características. Os jatos relativamente frios de gás natural e ar na entrada ficam bem delimitados. A chama corresponde à região de alta temperatura, que se estende e intensifica ao longo do

comprimento da câmara. Sua forma até cerca de 0,8 m é anelar, entretanto mais para o final da câmara ela ocorre também junto à linha de simetria. A cerca da metade do comprimento da câmara, próximo à linha de centro, pode-se verificar claramente uma região de temperaturas mais baixas, correspondente ao jato frio da entrada com alta velocidade. Há também um leve aumento na temperatura dos gases próximo às paredes da câmara, principalmente no lado esquerdo, onde predominam as temperaturas mais baixas. Este fenômeno está associado à transferência de calor por radiação. A região dos gases de temperaturas mais elevadas, próximo à saída da câmara, emite calor por radiação para as paredes, que absorvem e transmitem essa energia por convecção para os gases de temperatura mais baixa, próximos à região de entrada da câmara.

A Figura 2-b mostra a distribuição da taxa líquida de transferência de calor por radiação integrada no volume de cada volume de controle (Watt), no interior da câmara. Pode-se verificar nessa figura as regiões que mais emitem e mais absorvem energia por radiação. O sinal negativo caracteriza emissão de energia maior do que absorção, e o sinal positivo o contrário. Comparando as duas figuras é possível verificar a coerência dos resultados: as regiões que mais emitem são as regiões de temperaturas mais elevadas, e as que mais absorvem são as de temperaturas mais baixas, caracterizando a taxa líquida de transferência de calor por radiação.

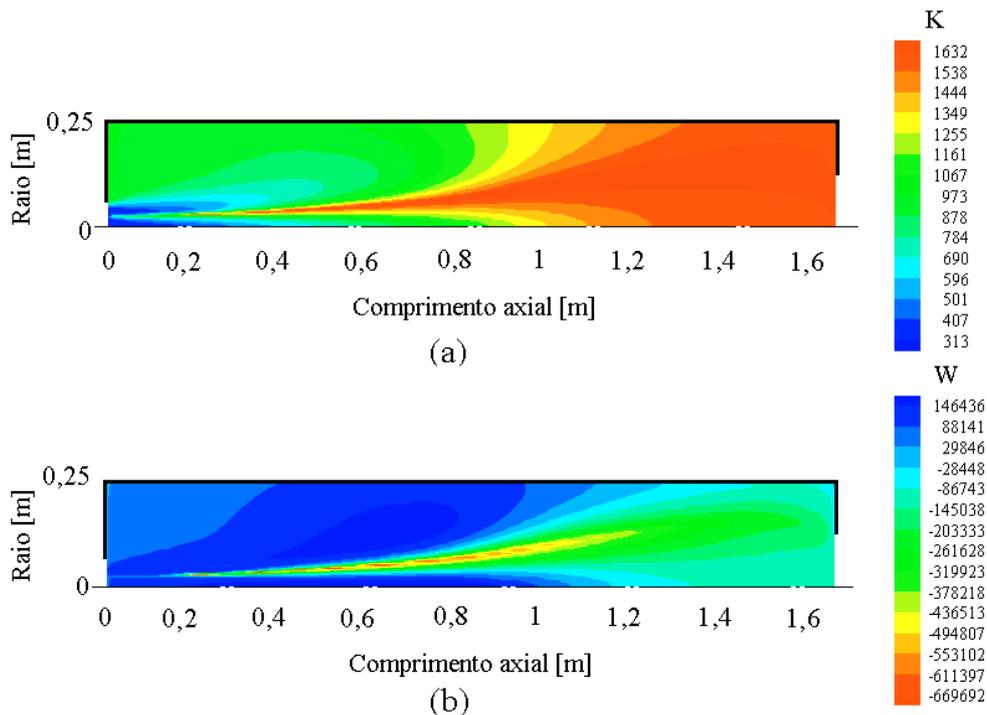


Figura 2. (a) Distribuição de temperatura (Kelvin); (b) Transferência de energia por radiação (Watt).

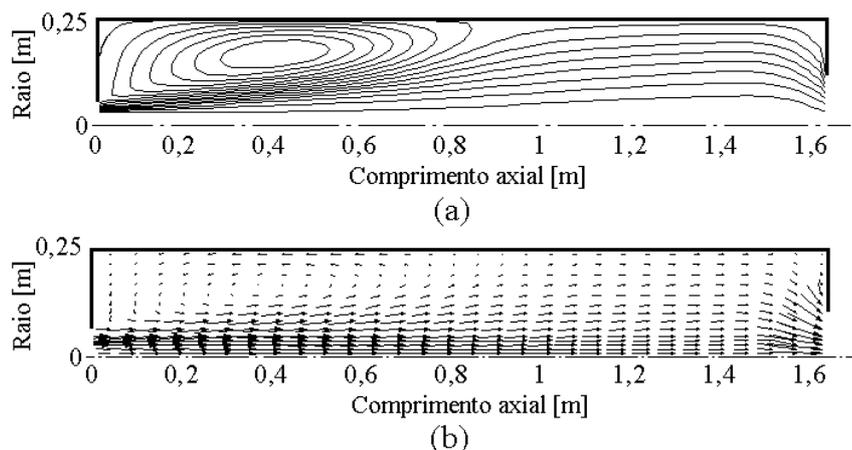


Figura 3. (a) Função de Corrente; (b) Vetores velocidade.

A Figura 3-a mostra as isolinhas de função de corrente. Pode-se observar na Fig. 3-a a existência de um escoamento secundário na forma de uma grande recirculação, situada na parte superior esquerda. Isso ocorre devido à elevada velocidade de injeção de ar e de combustível pelo queimador, situado logo abaixo desta recirculação, na entrada da câmara. Forma-se uma região de baixa pressão no canto superior esquerdo, fazendo uma inversão do fluxo, formando um vórtice que se mantém devido à tensão de cisalhamento com o escoamento principal. A Figura 3-b mostra o

comportamento dos vetores velocidade devido à presença dos fluxos de ar e de combustível. Por comparação entre as escalas dos vetores velocidade, as maiores velocidades no interior da câmara são de aproximadamente 37 m/s, e as menores cerca de 2 m/s. Deste modo pode-se verificar que as maiores velocidades, devidas ao decréscimo da massa específica dos gases decorrente do aumento de temperatura, estão localizadas mais ao centro da câmara de combustão (linha de simetria), e na região de saída. As velocidades mais baixas podem ser encontradas no interior da recirculação, e próximo às paredes.

A Figura 4-a mostra os perfis de temperatura dos gases quentes sobre a linha de simetria da câmara de combustão, para os resultados experimentais de Magel et al. (1996-b), e também da solução com o presente modelamento. Pode-se observar nesta figura que o perfil de temperatura dos gases obtido com o modelo SCRS possui boa concordância para uma pequena região próxima à zona de entrada dos fluidos. Por assumir reação química instantânea, o SCRS inicia o processo de combustão imediatamente após a injeção dos fluidos na câmara, aquecendo os gases e aumentando de forma mais abrupta a suas temperaturas, ocasionando a discrepância verificada entre os resultados. Por outro lado, verifica-se que os perfis apresentam praticamente a mesma temperatura na região de saída, concordando razoavelmente bem com os dados experimentais.

A Figura 4-b mostra os perfis de temperatura ao longo do raio da câmara, para a posição axial igual a 0,31 m, a partir da entrada. Pode-se observar que os resultados não apresentam boa concordância para essa posição. Efetivamente o modelo SCRS é pobre ao descrever a gama de concentrações ao longo da qual ocorre a combustão. Assumindo reações químicas instantâneas, ele é muito abrupto, e desta forma a chama anelar ocorre antes, raio=0,05 m, e se extingue prematuramente, predominando a partir desta região as temperaturas dos produtos da combustão, que retrocedem da região de temperaturas mais altas devido à presença da recirculação no escoamento (ver Fig. 3-a). Combustível em excesso foi consumido, no lugar de uma reação química mais suave e progressiva, conforme mostram os resultados experimentais. Verifica-se também que na região próxima à parede cilíndrica da câmara, raio \approx 0,24 m, ocorre um aumento de temperatura. Isso está associado à transferência de energia por radiação, conforme já mencionado anteriormente. Para esta posição não foram encontrados outros dados experimentais na literatura, a fim de se realizar comparações.

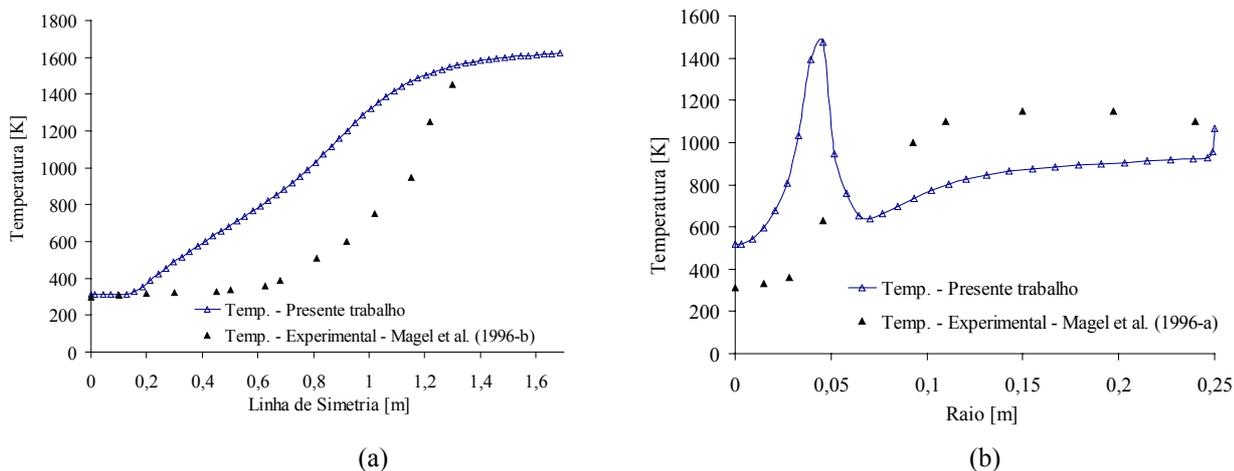


Figura 4. (a) Distribuição de temperatura sobre a linha de simetria; (b) Distribuição de temperatura em $x = 0,31$ m.

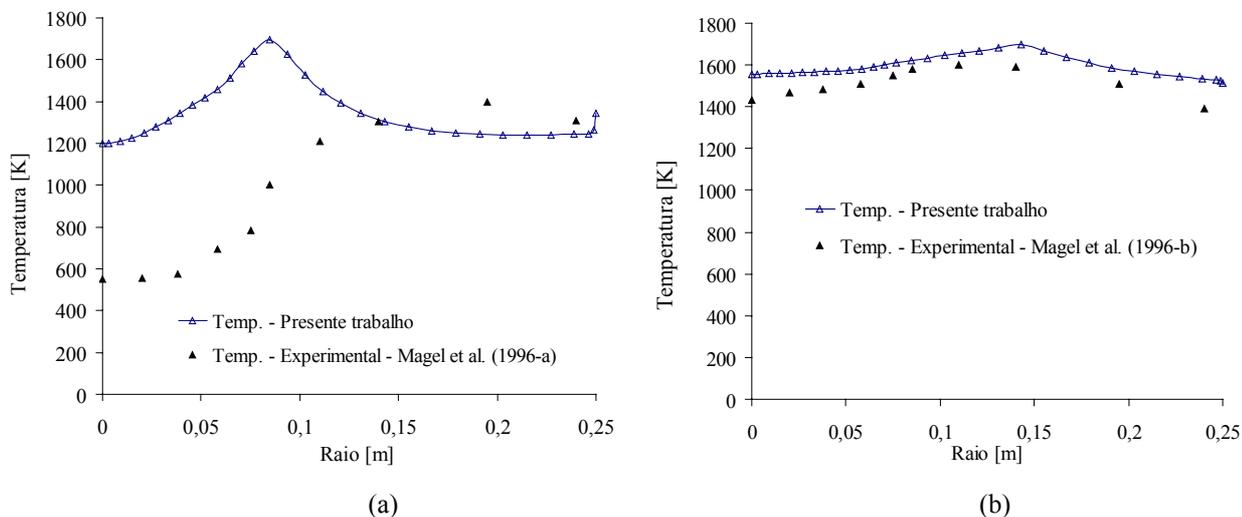


Figura 5. (a) Distribuição de temperatura na posição $x=0,91$ m.; (b) Distribuição de temperatura na posição $x=1,31$ m.

Nas Figuras 5-a e 5-b estão apresentadas as distribuições de temperatura ao longo do raio da câmara de combustão, para as posições axiais de 0,91 m e 1,31 m da entrada, respectivamente. Verifica-se na Fig. 5-a um comportamento semelhante ao apresentado na Fig. 4-b. Uma melhor concordância entre os resultados pode ser verificada na Fig. 5-b. Os perfis de temperatura estão um pouco afastados até a posição radial igual a 0,14 m. A partir desta posição existe excelente concordância. Verifica-se também que muito próximo à parede existe a influência da transferência de calor por radiação, aumentando a temperatura dos gases. Novamente, outros dados experimentais não foram encontrados para comprovar este efeito.

10. Conclusões

Baseado nesta investigação do processo de combustão com a presente modelagem, as seguintes conclusões podem ser apresentadas:

1- O SCRS é capaz de gerar resultados coerentes, em termos de tendências gerais, apenas para algumas regiões da câmara, tais como a periferia da chama, e região de saída da câmara onde as temperaturas são mais elevadas.

2- O SCRS não é bom ao descrever o processo de combustão no centro da chama, onde as reações químicas tendem a ser governadas pela cinética química e não pela turbulência.

3- Analisando de uma forma generalizada a magnitude das temperaturas, mais elevadas no interior da câmara, verifica-se uma boa concordância entre o presente modelo e os dados experimentais.

4- Devido à complexidade do processo de combustão e às simplificações assumidas pela modelagem utilizada no presente trabalho, o modelo SCRS deve ser utilizado apenas em investigações rápidas, de modo que um modelo de combustão mais sofisticado deve ser implementado quando se deseja obter resultados mais precisos. Esta implementação será realizada na continuação desta pesquisa.

11. Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio recebido pelo CNPq - Conselho de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - através da concessão de bolsa de doutorado.

12. Referências bibliográficas

- Carvalho, M.G., Farias, T. e Fontes, P., 1991. "Predicting radiative heat transfer in absorbing, emitting, and scattering media using the discrete transfer method", ASME HTD, Vol. 160, pp.17-26.
- da Silva, C. V. e Vielmo, H. A., 2003. "Numerical simulation of the combustion processes in cylindrical chambers". 17th International Congress of Mechanical Engineering - COBEM, São Paulo, SP., Brasil, ABCM.
- Eaton, A.M., Smoot, L.D., Hill, S. C. e Eatough, C.N., 1999. "Components, formulations, solutions, evaluations, and application of comprehensive combustion models", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 25, pp. 387-436.
- Fluent (ed.), 1997. "Fluent user's guide", Fluent Incorporated, New Hampshire.
- Freire, A.P.S., Menut, P.P.M. e Su, J., 2002. "Turbulência", Associação Brasileira de Ciências Mecânicas - ABCM, Rio de Janeiro - BR, Vol. 1.
- Garreton, D. and Simonin, O., 1994. "Aerodynamics of steady state combustion chambers and furnaces", ASCF Ercoftac CFD Workshop, October 17-18, Org: EDF, Chatou, France.
- Hottel, H. C. e Sarofim, A. F., 1967. "Radiative Transfer", McGraw-Hill Book Company, New York.
- Kuo, K.K., 1996. "Principles of combustion", John Wiley & Sons, New York.
- Launder, B.E. e Sharma, B.I., 1974. "Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc", Letters in Heat and Mass Transfer, Vol. 19, pp. 519-524.
- Launder, B.E. e Spalding, D.B., 1972. "Mathematical Model of Turbulence", Academic Press Inc. LTD.
- Magel, H.C., Schnell, U. e Hein, K.R.G., 1996-a. "Modeling of hydrocarbon and nitrogen chemistry in turbulent combustor flows using detailed reactions mechanisms", 3rd Workshop on Modeling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg.
- Magel, H.C., Schnell, U. e Hein, K.R.G., 1996-b. "Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow", Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 67-74.
- Magnussen B.F., Hjertager B. H., 1976. "On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. Proceedings of the 16th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, pp. 719-729.
- Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P. e Kobayashi, W. T. 1999-a. "The influence of the oxygen injection configuration in the performance of an aluminum melting furnace", ASME, International Mechanical Engineering Congress, Nashville.
- Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E. e Serfaty, R., 2001. "Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace", ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York.

- Nieckeke, A.O., Naccache, M. F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E. e Serfaty, R., 2002. "Predição da combustão de gás natural em uma fornalha utilizando reação em uma e duas etapas", CONEM – Congresso Nacional de Engenharia Mecânica – João Pessoa – PB.
- Nikuradse, J., 1933. "Strömungsgesetze in Rauhen Röhren", Forsch. Arb. Ing. – Ees.
- Özisik, M.N., 1985. "Heat Transfer", 1st edn, McGraw-Hill Book Company, New York.
- Patankar, S.V., 1980. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere", New York.
- Siegel, R. e Howell, J. R. , 2002. "Thermal Radiation Heat Transfer", 4th ed., Taylor & Francis, New York - London.
- Sika, P., 1991. "Evaluation of direct-exchange areas for a cylindrical enclosure", Transactions of the ASME - Journal of Heat Transfer Vol. 113, pp. 1040–1044.
- Spalding, D.B., 1979. "Combustion and Mass Transfer", Pergamon Press, Inc., New York.
- Van Wylen, G. J., Sonntag, E. R. e Bornake, C., 1998. Fundamentos da Termodinâmica, 5nd ed., Editora Edgard Blücher Ltda.
- Zeldovich, Y.B., Sadovnikov, P.Y. e Frank-Kamenskii, D.A., 1947. "Oxidation of nitrogen in combustion", Academy of Science of USSR, Moscow.

NUMERICAL SIMULATION OF THE COMBUSTION OF NATURAL GAS IN A CYLINDRICAL CHAMBER USING THE SCRS MODEL

Cristiano V. da Silva

Mechanical Engineering Graduate Program - Federal University of Rio Grande do Sul.
Rua Sarmento Leite, 425, 90050-170 - Porto Alegre, RS, Brazil
crisvitor007@yahoo.com.br

Horácio A. Vielmo

Mechanical Engineering Department - Federal University of Rio Grande do Sul.
Rua Sarmento Leite, 425, 90050-170 - Porto Alegre, RS, Brazil.
vielmo@meccanica.ufrgs.br

Francis H. R. França

Mechanical Engineering Department - Federal University of Rio Grande do Sul.
Rua Sarmento Leite, 425, 90050-170 - Porto Alegre, RS, Brazil.
frfranca@meccanica.ufrgs.br

Abstract. *This work presents a numerical simulation of the combustion of natural gas in a axisymmetrical cylindrical chamber with adiabatic walls. The combustion process is solved for stoichiometric reaction between natural gas (methane) and air. The numerical simulation considers a single stage combustion process with no premixing: the natural gas is injected into the chamber from a central circular duct, while the air is injected from an annular orifice centered on the central duct, both in the same plane. The simulation relies on the solution of mass, momentum, energy and chemical species conservation equations. The differential terms of the conservation equations are solved by means of the control volume approach. The integral relations of the radiative exchanges are modeled with the zonal method; the turbulence is tackled with the $k - \varepsilon$ model; and the combustion process is described by the SCRS (Simple Chemically-Reacting Systems) model. The results of the mathematical modeling allow finding the characteristics of the combustion zone, the distributions of the chemical species, and the fields of temperature and velocity. The temperature profiles are extremely important to predict the performance of the combustion chamber and to assist on its optimization. The results are validated by comparisons with experimental data available in the literature.*

Keywords. *Combustion, $k - \varepsilon$, SCRS, Zonal Method, Finite Volumes.*