

Universidade Federal de Campina Grande Centro de Ciências e Tecnologia Unidade Acadêmica de Engenharia Química Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

GUSTAVO GOMES SAMPAIO CURSINO

INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA NA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA EM UM COMBUSTOR VERTICAL DE LEITO FLUIDIZADO A ÓLEO COMBUSTÍVEL

Campina Grande - PB 2016

GUSTAVO GOMES SAMPAIO CURSINO

INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA NA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA EM UM COMBUSTOR VERTICAL DE LEITO FLUIDIZADO A ÓLEO COMBUSTÍVEL

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, em cumprimento às exigências para obtenção do título de Doutor em Engenharia Química. Orientadores: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves e Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo

Campina Grande - PB 2016

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

S725e Cursino, Gustavo Gomes Sampaio. Influência da geometria na distribuição de temperatura em um combustor vertical de leito fluidizado a óleo combustível / Gustavo Gomes Sampaio Cursino. – Campina Grande, 2016. 156 f. : il. color.
Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e tecnologia, 2016. "Orientação: Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves, Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo". Referências.
1. Combustão. 2. Modelagem. 3. CFX. I. Alves, José Jailson Nicácio. II. Araújo, Antônio Carlos Brandão de. III. Título.

GUSTAVO GOMES SAMPAIO CURSINO

INFLUÊNCIA DA GEOMETRIA NA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA EM UM COMBUSTOR VERTICAL DE LEITO FLUIDIZADO A ÓLEO COMBUSTÍVEL

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, em cumprimento às exigências para obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

APROVADA EM: 18 de abril de 2016.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. José Jailson Nicácio Alves Orientador

Prof. Dr. Antônio Carlos Brandão de Araújo Orientador

> Prof. Dr. André Luiz F. Brito Examinador Interno

Prof. Dr. Antônio Tavernard Pereira Neto Examinador Interno

> Prof. Dr. Sidinei Kleber Silva Examinador Externo

Prof. Dr. Rodolfo Jesus Rodriguez Silverio Examinador Externo

CAMPINA GRANDE – PB 2016

Dedico esta conquista à memória do meu tio Aldson Fernando Gomes de Lima pela inspiração, pelo apoio, pelo exemplo e por ter influenciado com sua história de vida a minha escolha pela profissão de Engenheiro Químico.

AGRADECIMENTOS

A Deus em primeiro lugar.

Aos meus "amigos velhos" Maria de Lourdes e Moacir (pais), Júnior e Michelle (irmãos), Rodrigo, Pedro e Arthur (sobrinhos), Bruna e Miguel (esposa e filho), por todas as histórias vividas, as risadas dadas e as batalhas vencidas.

Ao amigo Wener Miranda pela motivação, pelo apoio e pelo incentivo em tornar possível a realização deste trabalho.

Aos professores Jailson Nicácio, Antônio Carlos Brandão, Antonio Tavernard e Andrey Oliveira de Souza pelo apoio, pela orientação, pela contribuição nas simulações numéricas e pelo suporte intelectual para a realização deste trabalho.

"O saber a gente aprende com os mestres e com os livros. A sabedoria a gente aprende com a vida e com os humildes." Cora Coralina CURSINO, G. G. S. Influência da geometria na distribuição de temperatura em um combustor vertical de leito fluidizado a óleo combustível. 2016. 156 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2016.

RESUMO

Este trabalho teve o propósito de determinar o comportamento dos gases na seção de radiação de um combustor de ar que pertence a uma planta industrial. O corpo metálico do equipamento rompeu em seu primeiro ano de operação, devido a um problema conceitual em sua geometria. A fluidodinâmica computacional (CFD), por meio do método dos volumes finitos, foi utilizada para desenvolver um modelo tridimensional que pudesse reproduzir o perfil de temperatura e o comportamento do fluxo do ar de combustão no equipamento. Na simulação, através do uso do software ANSYS CFX, foram utilizados: (i) o modelo de turbulência *Reynolds Stress Model* (RSM); (ii) as malhas hexaédrica, tetraédrica e prismática; (iii) o modelo de radiação P-1; e (iv) o modelo de combustão *Eddy Dissipation Concept* (EDC). Como resultado, foram apresentadas quatro possíveis mudanças na geometria do combustor de ar que, caso adotadas, eliminariam os riscos de novas falhas e garantiriam a continuidade operacional da unidade de processo.

Palavras-chave: Combustão. Modelagem. CFX.

Cursino, G. G. S. The geometry Influence in the temperature distribution in a vertical fluidized bed combustion oil fired combustor. 2016. 156 p. Thesis (PhD) – Federal University of Campina Grande, Campina Grande, 2016.

ABSTRACT

This paper has the objective to describe the behavior of the flow and temperature of the flue gas in the radiation section of the vessel used to preheat air in a combustor. The equipment failed in its first operational year, due to a conceptual problem in its geometry. The CFD code based on finite volume method was applied to simulate the physical model of combustor using the ANSYS CFX software, reproducing the main features of the preheater. The simulation had considered: (i) Reynolds Stress Model (RSM) as turbulence model, (ii) The meshes applied were the hexahedral, tetrahedral and prismatic, (iii) P-1 was used as the radiation model and (iv) Eddy Dissipation Concept (EDC) as combustor geometry modification, that the application of anyone of them would eliminate the risk of new failures, ensuring the unit production availability.

Keywords: Combustion. Modeling. CFX.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
	1.1 COLOCAÇÃO DO PROBLEMA 20 1.2 OBJETIVO 23) }
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
	 2.1 COMBUSTÃO) 34 38 }
3	MATERIAIS E MÉTODOS	77
4	PROCEDIMENTO METODOLÓGICO	85
	 4.1 MODELAGEM DO COMBUSTOR NA CONDIÇÃO NORMAL DE PROJETO	3))) de 95 de 97 de 97 3
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	99
	 5.1 MODELAGEM DO COMBUSTOR NA CONDIÇÃO NORMAL DE PROJETO) 110 de 121 lo 130 de 140 I8
6	CONCLUSÕES1	152
7	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS 1	54
R	EFERÊNCIAS1	55

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – REPRESENTAÇÃO DO COMBUSTOR DE AR	22
FIGURA 2 – EXEMPLO DE CHAMA BEM AJUSTADA E CONTROLADA	29
FIGURA 3 – EXEMPLO DOS DIFERENTES TIPOS DE MALHAS	33
FIGURA 4 – ESTRUTURA DE QUALQUER MODELO EM CFD	34
FIGURA 5 – EXEMPLO DE UM VOLUME DE CONTROLE HEXAEDRO	36
FIGURA 6 – TÍPICA MEDIÇÃO DE VELOCIDADE EM UM FLUXO TURBULENTO	46
FIGURA 7 – ESCOAMENTO TURBULENTO RETRATADO PELA ABORDAGEM DNS	48
FIGURA 8 – ESCOAMENTO TURBULENTO RETRATADO PELA ABORDAGEM LES	49
FIGURA 9 – ESCOAMENTO TURBULENTO RETRATADO PELA ABORDAGEM RANS	49
FIGURA 10 – COMPARATIVO ENTRE MODELOS DE TURBULÊNCIA (Κ-Ε / Κ-Ω / SST) E DADOS EXPERIMENTAIS	59
FIGURA 11 – GEOMETRIA E CONDIÇÕES DE CONTORNO ADOTADAS NAS SIMULAÇÕES S1B	99
FIGURA 12 – REPRESENTAÇÃO DA MALHA DA SIMULAÇÃO S1B	100
FIGURA 13 – PERFIL DE TEMPERATURA NA CÂMARA DE COMBUSTÃO - SIMULAÇÃO S1B	100
FIGURA 14 – EXEMPLO DA SUPERFÍCIE INSERIDA PARA IDENTIFICAR A TEMPERATURA NA RE DA FALHA	GIÃO 102
FIGURA 15 – REPRESENTAÇÃO DA MALHA DA SIMULAÇÃO S1E	104
FIGURA 16 – COMPARAÇÃO ENTRE AS MALHAS DAS SIMULAÇÕES S1B E S1E	104
FIGURA 17 – PERFIL DE TEMPERATURA NA CÂMARA DE COMBUSTÃO - SIMULAÇÃO S1E	105
FIGURA 18 – COMPARATIVO DOS PERFIS DE TEMPERATURA – SIMULAÇÕES S1B E S1E	105
FIGURA 19 – REGIÃO DA FALHA SIMULADA (S1E) VERSUS REGIÃO DA FALHA REAL	106
FIGURA 20 – COMBUSTOR NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO DE PROJETO – SIMULAÇÃO S1E	.107
FIGURA 21 – S1E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 01 – SIMULAÇÃO S6A	108
FIGURA 22 – S1E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 02 – SIMULAÇÃO S6B	108
FIGURA 23 – S1E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 03 – SIMULAÇÃO S6C	109
FIGURA 24 – S1E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 04 – SIMULAÇÃO S6D	109
FIGURA 25 – GEOMETRIAS SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 01	111
FIGURA 26 – RECIRCULAÇÃO PROVOCADA PELA REDUÇÃO DO DUTO DE ENTRADA DE AR – S	S2D 114
FIGURA 27 – PERFIL DE TEMPERATURA NA CÂMARA DE COMBUSTÃO - SIMULAÇÃO S2B	115
FIGURA 28 – COMPORTAMENTO DOS FLUIDOS NO COMBUSTOR – SIMULAÇÃO S2B	115

FIGURA 29 – COMPARATIVO DOS PERFIS DE VELOCIDADE – SIMULAÇÕES S1E E S2B	116
FIGURA 30 – COMPARATIVO DOS PERFIS DE TEMPERATURA– SIMULAÇÕES S1E E S2B	117
FIGURA 31 – S2B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 01 – SIMULAÇÃO S7A	118
FIGURA 32 – S2B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 02 – SIMULAÇÃO S7B	119
FIGURA 33 – S2B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 03 – SIMULAÇÃO S7C	119
FIGURA 34 – S2B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 04 – SIMULAÇÃO S7D	120
FIGURA 35 – GEOMETRIAS SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 02	121
FIGURA 36 – PERFIL DE TEMPERATURA NA CÂMARA DE COMBUSTÃO - SIMULAÇÃO S3B	123
FIGURA 37 – COMPORTAMENTO DOS FLUIDOS NO COMBUSTOR – SIMULAÇÃO S3B	124
FIGURA 38 – COMPARATIVO DOS PERFIS DE TEMPERATURA – SIMULAÇÕES S1E E S3B	125
FIGURA 39 – S3B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 01 – SIMULAÇÃO S8A	127
FIGURA 40 – S3B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 02 – SIMULAÇÃO S8B	127
FIGURA 41 – S3B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 03 – SIMULAÇÃO S8C	128
FIGURA 42 – S3B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 04 – SIMULAÇÃO S8D	128
FIGURA 43 – GEOMETRIAS SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 03	130
FIGURA 44 – EFEITO DA REDUÇÃO DO DOMO NA DISTRIBUIÇÃO DE VELOCIDADE DO AR NA ENTRADA DO COMBUSTOR	133
FIGURA 45 – PERFIL DE TEMPERATURA NA CÂMARA DE COMBUSTÃO – SIMULAÇÃO S4E	134
FIGURA 46 – COMPORTAMENTO DOS FLUÍDOS NO COMBUSTOR – SIMULAÇÃO S4E	134
FIGURA 47 – COMPARATIVO DOS PERFIS DE TEMPERATURA – SIMULAÇÕES S1E E S4E	135
FIGURA 48 – S4E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 01 – SIMULAÇÃO S9A	137
FIGURA 49 – S4E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 02 – SIMULAÇÃO S9B	138
FIGURA 50 – S4E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 03 – SIMULAÇÃO S9C	138
FIGURA 51 – S4E NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 04 – SIMULAÇÃO S9D	139
FIGURA 52 – GEOMETRIAS SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 04	140
FIGURA 53 — PERFIL DE TEMPERATURA NA CÂMARA DE COMBUSTÃO — SIMULAÇÃO S5B	142
FIGURA 54 – COMPORTAMENTO DOS FLUIDOS NO COMBUSTOR – SIMULAÇÃO S5B	142
FIGURA 55 – COMPARATIVO DOS PERFIS DE TEMPERATURA – SIMULAÇÕES S1E VS S5B	143
FIGURA 56 – S5B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 01 – SIMULAÇÃO S10A	145
FIGURA 57 – S5B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 02 – SIMULAÇÃO S10B	146
FIGURA 58 – S5B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 03 – SIMULAÇÃO S10C	146
FIGURA 59 – S5B NAS CONDIÇÕES DE PRODUÇÃO 04 – SIMULAÇÃO S10D	147

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – COMPOSIÇÃO ELEMENTAR DE COMBUSTÍVEIS LÍQUIDOS (%)	26
TABELA 2 – CONDIÇÕES NORMAIS DE PROJETO UTILIZADAS NAS MODELAGENS	86
TABELA 3 – PARÂMETROS DE PROJETO DO COMBUSTOR	86
TABELA 4 – CONFIGURAÇÃO DA MALHA DA SIMULAÇÃO S1A	89
TABELA 5 – CONFIGURAÇÃO DA MALHA DA SIMULAÇÃO S1B	89
Tabela 6 – Malhas utilizadas no estudo de convergência	90
TABELA 7 – COMPARATIVO DAS DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 01	96
TABELA 8 – COMPARATIVO DAS DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 02	96
TABELA 9 – COMPARATIVO DAS DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 03	97
TABELA 10 – COMPARATIVO DAS DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 04	97
TABELA 11 – CENÁRIOS DE PRODUÇÃO SIMULADOS	98
Tabela 12 – Dealhes da malha da simulação S1B	101
TABELA 13 – ESTATÍSTICA DAS MALHAS UTILIZADAS NO ESTUDO DE CONVERGÊNCIA	101
TABELA 14 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S1E EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S6	106
TABELA 15 – DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 01	110
TABELA 16 – RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES DA MODIFICAÇÃO 01	112
TABELA 17 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S2B EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S7	117
TABELA 18 – DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 02	121
TABELA 19 – RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES DA MODIFICAÇÃO 02	122
TABELA 20 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S3B EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S8	126
TABELA 21 – DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 03	130
TABELA 22 – RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES DA MODIFICAÇÃO 03	131
TABELA 23 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S4E EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S9	136
TABELA 24 – DIMENSÕES SIMULADAS NA MODIFICAÇÃO 04	140
TABELA 25 – RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES DA MODIFICAÇÃO 04	141
TABELA 26 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S5B EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S10 .	144

LISTA DE FOTOS

FOTO 1 – REGIÃO DA FALHA NO COMBUSTOR	21
Foto 2 – Atomização de óleo com tamanho de gotícula correto	28
FOTO 3 – ATOMIZAÇÃO DE ÓLEO COM TAMANHO DE GOTÍCULA INCORRETO	28
Foto 4 – Danos ao refratário na região do combustor	77
Foto 5 – Desgaste do refratário evidenciado na câmara de combustão	77
FOTO 6 – TERMOGRAFIA DO TOPO DO COMBUSTOR ANTES DA FALHA	78
Foto 7 – Evidências do desgaste do revestimento durante inspeção interna na unidade	79
FOTO 8 – AMOSTRAS DO REVESTIMENTO REFRATÁRIO COLETADAS NA REGIÃO DA FALHA	80
Foto 9 – A mostras utilizadas nas análises químicas e de difração de raios X para análise " <i>post-mortem</i> " e de refratariedade sob carga	81
Foto 10 – Detalhe da região afetada pelo calor decorrente dos gases de combustão	82

LISTA DE GRÁFICOS

GRÁFICO 1 – RESULTADOS DO ESTUDO DE CONVERGÊNCIA DE MALHA102
GRÁFICO 2 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S1E EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S6107
GRÁFICO 3 – TEMPERATURAS MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA - MODIFICAÇÃO 01112
$Gráfico \ 4 - Velocidade \ \text{máxima no lado da redução} - Modificação \ 01113$
$Gráfico \ 5 - Velocidade \ \text{máxima no lado oposto a redução} - Modificação \ 01 \ 113$
GRÁFICO 6 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S2B EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S7118
GRÁFICO 7 – VELOCIDADES MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA - MODIFICAÇÃO 02122
GRÁFICO 8 – TEMPERATURAS MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA - MODIFICAÇÃO 02123
GRÁFICO 9 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S3B EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S8126
GRÁFICO 10 – VELOCIDADES MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA – MODIFICAÇÃO 03131
GRÁFICO 11 – TEMPERATURAS MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA – MODIFICAÇÃO 03132
GRÁFICO 12 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S4E EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S9136
GRÁFICO 13 – VELOCIDADES MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA - MODIFICAÇÃO 04141
GRÁFICO 14 – TEMPERATURAS MÁXIMAS NA REGIÃO DA FALHA - MODIFICAÇÃO 04141
GRÁFICO 15 – RESULTADOS SIMULAÇÃO S5B EM DIFERENTES PRODUÇÕES – SIMULAÇÃO S10
GRÁFICO 16 – COMPARAÇÃO DA TEMPERATURA NA REGIÃO DA FALHA – DADOS DE PROJETO
GRÁFICO 17 – COMPARAÇÃO DA TEMPERATURA NA REGIÃO DA FALHA – PRODUÇÃO 01 149
GRÁFICO 18 – COMPARAÇÃO DA TEMPERATURA NA REGIÃO DA FALHA – PRODUÇÃO 02 149
GRÁFICO 19 – COMPARAÇÃO DA TEMPERATURA NA REGIÃO DA FALHA – PRODUÇÃO 03 150
GRÁFICO 20 – COMPARAÇÃO DA TEMPERATURA NA REGIÃO DA FALHA – PRODUÇÃO 04 151

LISTA DE QUADROS

QUADRO 1 – COMPARAÇÃO ENTRE OS PRINCIPAIS MODELOS DE TURBULÊNCIA APLICADOS EM	
CFD	.60
QUADRO 2 – CONFIGURAÇÕES UTILIZADAS COMO SETUP DOS MODELOS	.87
QUADRO 3 – C ONFIGURAÇÃO BÁSICA DO COMBURENTE	.91
Quadro 4 – Configuração básica do combustível	.91
Quadro 5 – Configuração básica da mistura (comburente x combustível)	.92
QUADRO 6 – CONFIGURAÇÃO BÁSICA DOS CRITÉRIOS DE CONVERGÊNCIA	.92
Quadro 7 – Condição de contorno do ar primário nas condições de projeto	.92
Quadro 8 – Condição de contorno do ar total nas condições de projeto	.93
Quadro 9 – Condições de contorno do combustível nas condições de projeto	.93
Quadro 10 – Condições de contorno dos gases de combustão	.93
Quadro 11 – Condições de contorno da parede	.94
QUADRO 12 – CONDIÇÕES DE CONTORNO DA PRODUÇÃO 01	.94
QUADRO 13 – CONDIÇÕES DE CONTORNO DA PRODUÇÃO 02	.94
QUADRO 14 – CONDIÇÕES DE CONTORNO DA PRODUÇÃO 03	.95
QUADRO 15 – CONDIÇÕES DE CONTORNO DA PRODUÇÃO 04	.95

LISTA DE SIGLAS

- BPF Baixo Ponto de Fulgor
- CFD Computational Fluid Dynamics
- RSM Reynolds Stress Model
- DNS Direct Numerical Simulation
- LES Large Eddy Simulation
- RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation
- PDF Probability Density Function
- SST Shear Stress Transport
- RNG Grupo de renormalização
- EDC Eddy Dissipation Concept
- CFX Software utilizado para resolver problemas de fluido dinâmica
- EDP Equações Diferenciais Parciais
- ED Equações Diferenciais
- CAE Computer Aided Design
- IPT Instituto de Pesquisa e Tecnologia
- GJ Giga Joules
- UFCG Universidade Federal de Campina Grande
- 3D Tridimensional
- CPU Central Processing Unit (Processador do Computador)

LISTA DE SÍMBOLOS

α -Al ₂ O ₃	Córundum
$3AI_2O_3.2SiO_2$	Mulita
2CaO.Al ₂ O ₃ .SiO ₂	Guelenita
CaO.Al ₂ O ₃ .2SiO ₂	Anortita
NO _x	Óxidos de Nitrogênio
SO _x	Óxidos de Enxofre
CO ₂	Dióxido de Carbono
≤	Menor ou igual a
>	Maior que
<	Menor que
%	Percentagem
O°	Graus Celsius
α	Alfa
β	Beta
3	Epsilon
~	Aproximadamente

1 INTRODUÇÃO

A forte exigência que os países industrializados estão sofrendo para reduzir as emissões de dióxido de carbono (CO₂) e ao mesmo tempo reduzir os custos com energia levou a indústria a direcionar esforços e investimentos para o desenvolvimento de novas tecnologias de combustores. Um dos caminhos que vem se mostrando promissor para o atendimento desses requisitos é a utilização de altas temperaturas do ar de combustão.

O Japão é o país que está liderando e impulsionando a implementação dessa tecnologia de combustão que visa a economizar energia, sendo por isso considerada ecologicamente correta. Lá, esse tipo de tecnologia, conhecida como *High Temperature Air Combustion* (Hitac), foi inicialmente aplicada na indústria do aço, na qual tipicamente se trabalha com temperaturas do ar na faixa entre 1000°C e 1300°C.

Esse é exatamente o papel que o combustor de leito fluidizado, aqui estudado, deve exercer na unidade de processo. Ele é o equipamento responsável por preaquecer o ar de combustão do patamar de 500°C para 1000°C. E essa elevação na temperatura do ar implica um aprimoramento da eficiência da reutilização do calor e a consequente redução do custo com combustível.

Para isso, o combustor foi projetado para operar com altas temperaturas internas e a baixas pressões de operação. O combustível utilizado é o óleo com baixo ponto de fulgor (BPF), que é queimado fornecendo energia para o processo e é atomizado através de um queimador projetado para proporcionar um melhor ajuste no tamanho das gotas de óleo combustível, neutralizando com isso o aumento da emissão de NOx, provocado pelas altas temperaturas do ar de combustão.

O combustor faz parte do projeto de uma nova unidade industrial, que na teoria deveria atender aos seguintes requisitos:

- (i) Aumento de produção;
- (ii) Maior disponibilidade;
- (iii) Maior qualidade do produto final;
- (iv) Menores custos de produção;

- (v) Maior eficiência energética do processo;
- (vi) Reduzida perda de energia para o ambiente; e
- (vii) Baixíssimo custo de manutenção.

Já na prática, o que realmente ocorreu no início da operação foi:

- (i) Queda na disponibilidade;
- (ii) Redução da qualidade do produto;
- (iii) Aumento dos custos de produção;
- (iv) Perda de energia para o ambiente;
- (v) Indícios de deterioramento do revestimento refratário.

Não bastasse isso, ocorreu um problema, sem precedentes, que acarretou a ruptura da chapa metálica do combustor de ar e, consequentemente, a parada prematura da unidade industrial. Tal situação transformou-se no maior desafio de nosso histórico profissional de quase 15 anos. No entanto, resolver esse problema catastrófico tornou-se o ponto de partida deste trabalho.

1.1 COLOCAÇÃO DO PROBLEMA

Contrariando o que havia sido projetado, em apenas poucos meses de operação, o novo combustor de ar apresentou elevada perda de energia para o ambiente, uma vez que a temperatura na face externa do equipamento estava constantemente elevada, atingindo valores próximos à temperatura de fratura do metal. As temperaturas excessivas davam indícios de que o revestimento refratário estava se deteriorando rapidamente.

E, justamente na região próxima ao queimador, a condição de operação com temperaturas extremamente elevadas acarretou a falha do equipamento (Foto 1), forçando a unidade a sofrer sua primeira – grande e não programada – parada para manutenção.



Foto 1 - Região da falha no combustor

Fonte: Acervo pessoal

Com o nível de conhecimento que se tinha no momento e com base na análise de todo o histórico de problemas relacionados a combustores que a empresa possuía ao longo de seus muitos anos de operação, as hipóteses mais prováveis que estariam relacionadas à falha do equipamento e poderiam tê-la causado eram:

- I. Erro na aplicação do revestimento refratário;
- II. Baixa qualidade do material refratário aplicado;
- III. Queda do revestimento refratário devido a choque térmico;
- IV. Degradação do material refratário por contaminação com o combustível;
- V. Erro na seleção do material refratário;
- VI. Problema com a fluidodinâmica do equipamento.

Dentre as hipóteses, o problema fluidodinâmico do equipamento era o de menor probabilidade, em termos históricos; entretanto, pela prematuridade do evento e magnitude da falha, tornou-se a hipótese mais provável, e é justamente essa hipótese que pretende-se provar com este trabalho.

De uma forma geral, o combustor aqui retratado é composto de um queimador no topo e sua zona de combustão desenvolve-se ao longo de um corpo cilíndrico. Devido à posição do queimador, a região do topo, historicamente, é a região de maior concentração de calor. A área destacada em verde na Figura 1 representa a região de interesse, por ser tratar da área do equipamento na qual ocorreu a falha.

Figura 1 - Representação do combustor de ar



Fonte: Desenho de arranjo do projeto detalhado do combustor.

O fluxo total de ar da unidade entra, tangencialmente, na câmara de combustão por meio de um duto à temperatura de aproximadamente 500°C (773 K); o ar já aquecido e na temperatura de combustão 760°C $\leq T_{comb} \leq 1250$ °C (1033 K $\leq T_{comb} \leq$ 1523 K) sai pela parte inferior da câmara, fornecendo energia ao processo.

1.2 OBJETIVO

Pelo exposto até aqui, o desenvolvimento deste trabalho teve como força motriz a necessidade da realização de um estudo detalhado do sistema do combustor de leito fluidizado. Seu objetivo geral é analisar o comportamento dos fluidos presentes no sistema de aquecimento do ar de combustão.

Especificamente, desejava-se analisar a influência da geometria na distribuição de temperatura na câmara de combustão e apresentar as devidas modificações necessárias para eliminar a causa raiz do problema que acarretou a destruição de parte do revestimento refratário e o derretimento da chapa metálica estrutural do equipamento.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Como todo o trabalho foi fomentado por um problema real, que ocorreu em uma unidade industrial, espera-se com esta tese expor e agrupar a maior gama de informações possível adquirida durante todo o processo de investigação e solução do problema, incluindo tanto aquelas informações extraídas da literatura quanto as informações e os conhecimentos que foram adquiridos através da experiência prática no dia a dia do chão de fábrica.

Os tópicos a seguir estão ordenados de forma a auxiliar e orientar a construção do raciocínio lógico e consolidar o conhecimento adquirido, à medida que as informações forem sendo apresentadas. Elas partirão de um ponto de vista mais geral e convergirão para assuntos mais centrais e específicos do sistema de combustão do combustor, que é o foco deste trabalho.

2.1 COMBUSTÃO

De maneira geral, define-se combustão de várias formas, podendo ser destacadas as seguintes definições:

- Rápida reação exotérmica que libera substancial energia na forma de calor e chama, como reações de combustão com a habilidade de propagar-se através de um meio adequado (El-Mahallawy e El Din Habik) (1);
- Específico grupo de reações químicas nas quais o combustível e o oxigênio queimam juntos a uma temperatura suficientemente alta para liberar calor e produtos de combustão (Mullinger e Jenkins) (2);
- Rápida combinação do oxigênio com um combustível, resultando na liberação de calor (Reed) (3).

Apesar das diferentes formas de definição utilizadas, todos os autores concordam que a combustão é a força propulsora de todo o desenvolvimento industrial

e que dominá-la sempre foi um dos maiores desafios da humanidade, seja do ponto de vista de processo, devido à eficiência energética, ou do ambiental, quando se trata do controle das emissões dos gases de combustão.

Sempre que se fala em sistema de combustão, o tema segurança assume extrema relevância. O maior perigo é a possibilidade de haver uma violenta explosão, resultante da reação entre o combustível, o ar e o calor sob condições inadequadas. Para que isso ocorra, os três componentes do ciclo de combustão devem estar presentes:

- Combustível;
- Oxigênio;
- Ignição.

Em geral, os momentos mais perigosos para os equipamentos de combustão são a partida e a parada. Portanto, é essencial que seja feito todo o esforço para manter o equipamento em operação e, consequentemente, fora de condições adversas de operação, nas quais o controlador lógico de segurança venha a desligar a unidade, através de intertravamentos.

Vários equipamentos são utilizados nos processos de combustão, para controle ou para aumento da sua eficiência. Entre os principais estão os queimadores, dispositivos utilizados tanto para combustíveis gasosos como para líquidos, que podem ser utilizados para combustíveis sólidos quando pulverizados ou gaseificados, segundo Marques, Haddad e Martins (4).

Na Tabela 1, encontra-se a composição padrão dos mais comuns combustíveis líquidos utilizados na indústria.

Composição (%)	Óleo A (BPF)	Óleo C (OC-4)	Óleo D (BTE)	Óleo E	Óleo Diesel	Querosene
Carbono	84,8	85,4	87,4	85,6	86	85,6
Hidrogênio	11,1	12,3	11,8	10,4	13,1	14,3
Enxofre	4	2,3	0,7	4	0,9	0,1
H ₂ 0	Traços	Traços	Traços			
Cinzas	Traços		Traços			

Tabela 1 – Composição elementar de combustíveis líquidos (%)

Fonte: Máquinas Térmicas I, Princípios da Combustão, Luiz Carlos Martinelli Jr. - Unijui.

O progresso da combustão é controlado pela habilidade da mistura ar/combustível de formar uma mistura inflamável, e este processo é controlado pela difusão do combustível e do ar. Para os combustíveis líquidos, o combustível e o ar não são injetados na zona de combustão na fase gasosa, porém isso ocorre por causa das gotas de combustível que são injetadas pelo queimador, transmitindo a sua dinâmica no ar ambiente através do arrasto aerodinâmico.

A característica primordial do combustor é transferir, ao ar, o calor necessário gerado pela queima do combustível, com o máximo de eficiência, uniformidade e segurança. Para atingir essas características, a construção desse tipo de equipamento requer um cuidadoso estudo de transferência de calor e dos meios de minimizar as perdas por meio da chaminé e da radiação, devendo ser considerados quatro pontos básicos:

- O ar deve absorver o máximo de calor disponível, devendo a velocidade dos gases ser função da condutividade térmica do material, de seu calor específico e da capacidade do combustor;
- 2. A câmara de combustão deve ser projetada para gerar quantidade de calor proporcional à absorção de calor pelo ar;
- A qualidade do refratário e o isolamento térmico do combustor devem receber atenção especial;
- A transferência de calor da chama para o ar deve ser a mais adequada possível.

No processo aqui retratado, é fato comprovado que o sistema de combustão corresponde ao sistema mais importante no que diz respeito à eficiência energética, à qualidade do produto, à eficiência térmica, e ao custo de produção e manutenção. Dos vários problemas inerentes ao sistema de combustão e que impactam a operação da unidade, os mais comuns são:

- Produto fora de especificação devido à má combustão do óleo combustível;
- Temperaturas excessivas na parede externa, colocando a integridade física dos equipamentos em risco;
- Maior custo de produção devido à ineficiência da queima, acarretando um maior consumo de combustível;
- Maior custo de manutenção devido a um maior desgaste do revestimento refratário;
- Emissões atmosféricas operando no máximo ou fora do limite permitido;
- Risco de explosão.

Falando especificamente do combustível utilizado no processo, o óleo BPF, pode-se dividir a sua combustão em quatro fases. Como em toda queima de combustíveis líquidos, essas fases seguem a seguinte ordem:

- 1. Atomização, quando o combustível é dividido em várias gotículas;
- 2. Vaporização, quando as gotículas são vaporizadas;
- 3. Mistura, quando o combustível vaporizado mistura-se ao comburente;
- 4. Combustão, quando se inicia a reação exotérmica.

A atomização é a fase mais importante, por ser determinante para que a mistura de ar/combustível ocorra de maneira adequada, permitindo uma maior eficiência de combustão. Nessa fase, é admitido o ar primário para facilitar o processo da desagregação do líquido.

No queimador do combustor de ar, o método de atomização é por fluido. Esse método consiste em direcionar o combustível para o bico do queimador, onde encontra uma corrente de vapor pressurizado e é atomizado.

O vapor é usado como meio de atomização para assegurar um tamanho de gotícula ótimo para combustão. O mais indicado é que o vapor seja controlado individualmente por queimador e sua pressão seja continuamente mantida acima da pressão do óleo, no bico do queimador.

As Fotos 2 e 3 retratam bem a diferença entre uma boa e uma má atomização.



Foto 2 – Atomização de óleo com tamanho de gotícula correto

Fonte: Acervo pessoal



Foto 3 – Atomização de óleo com tamanho de gotícula incorreto

Fonte: Acervo pessoal

Na Figura 2, tem-se representada a configuração ideal de uma chama, de acordo com uma boa atomização do óleo, na qual os tamanhos das gotículas estão corretos.

Logo, tem-se uma boa pulverização do combustível que, na presença do ar e da fonte de calor, resultará em uma excelente reação de combustão, cujo resultado é uma chama bem ajustada e controlada.



Figura 2 – Exemplo de chama bem ajustada e controlada

A chama é usualmente definida por Winterbone e Turan (5) como sendo o mecanismo pelo qual a combustão de hidrocarbonetos ocorre no ar. Ela é a região em que a quebra inicial das moléculas de combustível ocorre. Existem basicamente dois tipos diferentes de chama: a chama de pré-mistura (*premixed*) e a chama por difusão (*non-premixed*).

Na chama de pré-mistura, a mistura, geralmente homogênea, do ar e do combustível ocorre durante o processo de admissão, ou seja, o combustível e o comburente são misturados antes da reação. Já a chama por difusão ocorre em situações de mistura heterogênea do ar e do combustível, quando regiões de misturas ricas e pobres em termos de combustível existem em várias regiões da câmara de combustão.

Como no combustor a combustão ocorre em várias regiões, é apropriado lembrar que os 03 (três) parâmetros do processo de queima – temperatura, turbulência e tempo – têm que ser otimizados para obter uma queima boa e limpa.

A estratégia utilizada, no projeto, para aumentar a eficiência da combustão foi a utilização de difusor na injeção do ar primário. Tudo isso para proporcionar um incremento no tempo de residência na zona primária da queima, sem precisar construir

Fonte: Acervo pessoal

essa região excessivamente longa, além de promover uma maior turbulência e consequentemente uma melhor mistura.

2.2 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

A fluidodinâmica computacional (CFD), do inglês *Computational Fluid Dynamics,* é a ciência da previsão de fluxo de fluidos, transferência de calor, transferência de massa, reações químicas e fenômenos relacionados (Engineering Simulation and Scientific Software) (6).

É um método de engenharia utilizado, entre outras coisas, para simular: (i) o comportamento de sistemas; (ii) os processos e equipamentos envolvendo líquidos e gases; (iii) a transferência de massa e energia; e (iv) as reações químicas e fenômenos físicos (Ansys, Inc.) (7).

Apesar de seus primórdios terem sido na década de 1960, com a indústria aeroespacial, seus primeiros sucessos ganharam destaque na década de 1970. A criação da indústria de serviços utilizando fluidodinâmica computacional foi iniciada na década de 1980, entretanto a indústria expandiu significativamente na década de 1990, (CFD-Online) (8).

Hoje, a dinâmica dos fluidos representa um papel importante em muitos dos produtos que são utilizados todos os dias. Trata-se de uma tecnologia que permite uma análise aprofundada no mecanismo do escoamento, presente nos mais diversos tipos de produtos e processos (Ansys, Inc.) (9). Por exemplo:

- Sistema de tratamento d'água;
- Sistemas de ar-condicionado;
- Aerodinâmica de carros, barcos e aviões;
- Desenvolvimento de materiais esportivos (Ex. Maiôs utilizados pelos nadadores);
- Desenvolvimento de novos tipos de plásticos e vidros;
- Novas terapias médicas.

30

Para se ter uma ideia, quase todas as empresas que aparecem na lista das top 100 da revista Fortune investem em engenharia de simulação e consideram-na como um ponto-chave e estratégico para se tornar uma empresa vencedora diante da concorrência globalizada (Ansys, Inc.) (7).

O motivo disso não é apenas o fato de a fluidodinâmica computacional reduzir a necessidade de protótipos e proporcionar substancial redução de tempo e custo com novos projetos. Mas também o fato de permitir a compreensão de dados que não são facilmente obtidos através de testes experimentais e estudar os sistemas sob condições ambientais perigosas, podendo ir além de seus limites normais de operação e desempenho. Isso sem falar no nível praticamente ilimitado de detalhe que se pode obter com os resultados das simulações (Versteeg e Malalasekera) (10).

No mais, a simulação pode ser utilizada para complementar testes físicos e testes práticos, ajudar na tomada de decisões antes de se investir em novos projetos ou sistemas, e auxiliar na resolução de problemas de uma forma mais rápida e segura. Pode ainda ser utilizada na otimização de processos, acarretando aumento de rendimento, confiabilidade e produção (Ansys, Inc.) (7).

Como já foi citado, o campo da dinâmica dos fluidos computacional tem uma ampla gama de aplicabilidade. No entanto, independentemente da aplicação específica em estudo, Zingg, Lomax e Pulliam (11) apresentam uma sequência de passos que geralmente deve ser seguida para a obtenção de uma solução satisfatória:

1) Especificação do problema e preparação da geometria

O primeiro passo envolve a especificação do problema, incluindo a geometria, as condições de fluxo e os requisitos da simulação.

A geometria pode resultar de medições de uma configuração existente ou pode estar associada a um estudo de *design*.

Os requisitos da simulação incluem questões como o nível de precisão necessário, o tempo de resposta exigido e os parâmetros da solução de interesse. As duas primeiras dessas exigências são muitas vezes conflitantes e, por isso, assumir determinados riscos, devido às simplificações e aos compromissos com as premissas adotadas, se faz necessário.

2) Seleção das equações que governam o problema e condições de contorno

Uma vez que o problema tenha sido especificado, um conjunto apropriado de equações que o governam e de condições de contorno deve ser selecionado. É geralmente aceito que os fenômenos de importância para o campo da dinâmica dos fluidos contínuos são regidos pela conservação de massa, momentum e energia.

As equações diferenciais parciais (EDP), resultantes dessas leis de conservação, são referidas como as equações de Navier-Stokes. No entanto, no interesse da eficiência é sempre prudente considerar a resolução das formas simplificadas das equações de Navier-Stokes, quando tais simplificações mantêm a física que é essencial para os objetivos da simulação. Possíveis simplificações incluem as equações de fluxo potenciais, as de Euler e as de camada limite de Navier-Stokes. Elas podem ser estáveis ou instáveis, e compressíveis ou incompressíveis.

Em meio aos tipos de condições de contorno que podem ser encontrados, incluem-se: (i) paredes sólidas, (ii) fluxo de entrada e de saída, (iii) periodicidade, (iv) simetria etc. As condições de contorno que devem ser especificadas dependem das equações que as governam. Por exemplo, em uma parede sólida, as equações de Euler requerem fluxo tangencial para serem aplicadas, enquanto as equações de Navier-Stokes requerem a condição de velocidade zero (*no-slip condition*).

Se necessário, os modelos físicos devem ser escolhidos para processos que não podem ser simulados dentro dos limites especificados. Turbulência é um exemplo de processo físico que é raramente simulado em um contexto prático e, portanto, é muitas vezes modelado.

O sucesso de uma simulação depende muito da sua visão de engenharia, ou seja, da física envolvida, para só então selecionar as equações que a governam e os modelos físicos baseados na especificação do problema.

3) Seleção da estratégia da malha e método numérico

O passo 3 é a escolha do método numérico e da estratégia para dividir o domínio do fluxo, seja em células ou em elementos. Preocupa-se aqui apenas com o método numérico que requer tal trama (estrutura tridimensional) do domínio, que é conhecido como uma grade (*grid*) ou, mais comumente, como malha (*mesh*).

Existem diferentes estratégias de malhas, incluindo as malhas estruturadas, as não estruturadas, as híbridas, as compostas e as sobrepostas, conforme pode ser visto na Figura 3.





Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

Os métodos numéricos geralmente utilizados no CFD podem ser classificados como: diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos ou métodos espectrais. As escolhas de um método numérico e de uma estratégia de malha são fortemente interdependentes.

A utilização do método de diferenças finitas é, usualmente, limitada a malhas estruturadas. Aqui, novamente, o sucesso de uma simulação pode depender das escolhas apropriadas para o problema ou para a classe de problemas de interesse.

4) Avaliação e interpretação dos resultados

Finalmente, os resultados da simulação devem ser avaliados e interpretados. Este passo pode exigir o pós-processamento dos dados. Por exemplo, o cálculo das forças e do momentum pode ser auxiliado por sofisticadas ferramentas de visualização de fluxo e técnicas de estimativa de erro. É crítico que a magnitude de ambos os erros, tanto os numéricos quanto os dos modelos físicos, seja bem entendida. A Figura 4 resume bem tudo o que foi dito acima e dá uma visão geral da estrutura de qualquer modelo em CFD.



Figura 4 – Estrutura de qualquer modelo em CFD

Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

2.2.1 Como um código CFD trabalha

De acordo com Versteeg e Malalasekera (10), os códigos CFD estão estruturados em torno dos algoritmos numéricos que podem resolver os problemas de fluxo de fluidos. A fim de facilitar o acesso ao seu poder de resolução, todos os pacotes comerciais incluem uma sofisticada interface com o usuário, para que ele possa inserir os parâmetros do problema, assim como extrair os seus resultados. Portanto, todos os códigos contêm três elementos principais: o pré-processador, o processador "*solver*" e o pós-processador.

2.2.1.1 Pré-Processador

O pré-processador consiste na entrada de um problema de fluxo, em um programa de CFD, por meio de uma interface amigável com o operador, e na subsequente transformação desta entrada em uma forma adequada para que seja processada pelo "*solver*".

As atividades dos usuários na fase de pré-processamento envolvem:

- Definição da geometria na região de interesse;
- Geração da malha ou, simplesmente, a subdivisão do domínio em uma série de pequenos volumes de controle;
- Seleção dos fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados;
- Definição das propriedades do fluido;
- Especificação das condições de contorno apropriadas nas células as quais coincidem com os limites do domínio.

A solução para o problema do fluxo (velocidade, pressão, temperatura etc.) é definida nos "nós" dentro de cada célula e a assertividade da solução do CFD é governada pelo número de células da malha.

Geralmente, quanto maior o número de células, melhor é a assertividade da solução (Versteeg e Malalasekera) (10). Logo, dividir o domínio em vários volumes de controle é o que pode, ou não, garantir a precisão e a eficiência da simulação.

Na verdade, o modelo numérico para solução dos problemas em CFD consiste em discretizar as EDPs em equações algébricas, para que possam ser "interpretadas" pelas máquinas (computadores). Se o método numérico é consistente e estável, a convergência é atingida e, assim, a solução dita "exata" é obtida.

Porém, cabe o alerta de que modelos baseados em previsões nunca são 100% confiáveis, porque os dados de entrada podem envolver demasiada suposição de trabalho ou imprecisão. Lembrando que, como no *solver* tudo é resolvido por métodos interativos, o usuário precisa fornecer os valores iniciais de no mínimo 01 (uma) das condições de contorno nas fronteiras dos domínios: velocidade, vazão, pressão etc.

2.2.1.2 Processador - Solver

O processador é o componente que resolve os problemas no CFD. O *solver* da ANSYS, software utilizado neste trabalho, baseia-se no método de volumes finitos (MVF), e seu problema é resolvido da seguinte forma:

 O domínio é discretizado em um conjunto de volumes de controle, conforme exemplificado na Figura 5;





Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

 As equações diferenciais parciais são integradas ao longo de todos os volumes de controle da região de interesse. Isso é equivalente à aplicação de uma lei de conservação básica (conservação de massa, momentum, energia, espécies etc.) para cada volume de controle;
Essas equações integrais são discretizadas em um sistema de equações algébricas através da geração de um conjunto de aproximações para os termos nas integrais, conforme demostrado na (1;

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho \phi \, dV + \oint_{A} \rho \phi \mathbf{V} \cdot d\mathbf{A} = \oint_{A} \Gamma_{\phi} \nabla \phi \cdot d\mathbf{A} + \int_{V} S_{\phi} \, dV$$
(1)

TRANSIENTE CONVECÇÃO DIFUSÃO

Para obter as diferentes equações fundamentais de transporte, a variável Φ assume diferentes valores na (1, conforme abaixo:

- Para equação de continuidade: Φ = 1
- Para equação de momentum no eixo X: Φ = u
- Para equação de momentum no eixo Y: $\Phi = v$
- Para equação de momentum no eixo Z: Φ = w
- Para equação de energia total (entalpia): Φ = h
- Para equação de energia térmica (temperatura): Φ = t
- 4) Todas as equações algébricas são, então, resolvidas numericamente, ou seja, iterativamente, para renderizar o campo de solução.

Uma abordagem iterativa é necessária por causa da natureza não linear das equações. Para cada iteração, um erro, ou resíduo, é relatado como uma medida da conservação global das propriedades de fluxo. O quão perto a solução final está da solução exata depende de alguns fatores, incluindo o tamanho e a forma dos volumes de controle e o tamanho dos resíduos finais.

Processos físicos complexos, tais como a combustão, são muitas vezes modelados utilizando relações empíricas. As aproximações inerentes a esse modelo também contribuem para as diferenças entre a solução simulada em CFD e o fluxo real.

2.2.1.3 Pós-processador

O pós-processador vem recebendo grande atenção e sendo bastante desenvolvido nos softwares de CFD; isso porque a visualização dos resultados permite melhorar o entendimento do usuário acerca do comportamento do fluido em torno da região de interesse.

Por exemplo, a representação e análise dos resultados de uma determinada variável de interesse como os campos de velocidade, pressão, temperatura, trajetória das partículas, concentração de uma determinada substância, entre outras, fica muito mais fácil e acessível quando se tem uma boa representação da geometria do domínio e da malha.

Estão disponíveis nos pós-processadores dos pacotes de CFD várias opções de relatórios e ferramentas. Entre as mais variadas formas de apresentação dos resultados, as mais usuais são: as animações, os gráficos, os vídeos, as linhas, os vetores e os planos coloridos, além de representações em duas e três dimensões (2D e 3D).

2.2.2 Fundamentos da dinâmica dos fluidos

Neste item, pretende-se detalhar os fundamentos e a matemática que estão por trás das soluções dos problemas de escoamento de fluido que são definidos pelas leis da conservação de massa, momentum e energia. Também será feita a discretização, baseada na técnica de elementos finitos, dessas leis que são expressas em termos de equações diferenciais parciais (EDP).

As suposições sobre o fluido e a análise são as seguintes:

- 1) Há apenas uma fase.
- 2) O usuário deve determinar: (a) se o problema é laminar (padrão) ou turbulento;
 (b) se deve ser considerado o algoritmo para fluxo incompressível (padrão) ou compressível.

2.2.2.1 Equação da conservação de massa (continuidade)

A partir da lei da conservação de massa, vem a equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \vee_{\chi})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \vee_{y})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \vee_{z})}{\partial z} = 0$$
(2)

Onde:

 v_x , v_y e v_z = componentes do vetor velocidade na direção x, y e z, respectivamente

 ρ = densidade

x, y, z = coordenadas cartesianas globais

t = tempo

A taxa de variação da densidade pode ser substituída pela taxa de variação da pressão, e a taxa em que a densidade muda com a pressão pode ser obtida por:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t}$$
(3)
Onde:

P = pressão

A avaliação da derivada da densidade, com respeito à pressão, vem da equação de estado. Se o algoritmo para fluido compressível é usado, um gás ideal é assumido:

$$\rho = \frac{P}{RT} \Longrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial P} = \frac{1}{RT}$$
(4)

Onde:

R = constante dos gases

T = temperatura

Se o algoritmo, padrão, de solução incompressível, é usado, o usuário pode controlar a especificação do valor com:

$$\frac{d\rho}{dP} = \frac{1}{\beta}$$
(5)
Onde:

 β = módulo da massa

O valor padrão de 10^{15} para β implica que, para um fluido perfeitamente incompressível, ondas de pressão "viajarão" infinitamente rápido em todo o domínio do problema, ou seja, uma alteração no fluxo de massa será vista, imediatamente, a jusante.

2.2.2.2 Equação de conservação da quantidade de movimento (momentum)

Em um fluido newtoniano, a relação entre a tensão e a taxa de deformação do fluido (em notação de índice) é:

$$\tau_{ij} = -P \,\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{6}$$

Onde:

O termo final, o produto do segundo coeficiente da viscosidade e a divergência da velocidade, é zero para um fluido de densidade constante e é considerado suficientemente pequeno para ser negligenciado em um fluido compressível.

A (5 transforma as equações de momentum em equações de Navier-Stokes.

As equações de momentum, sem considerações adicionais referentes às suas propriedades, são como se segue:

40

$$\frac{\partial \rho \vee_{\chi}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \vee_{\chi} \vee_{\chi})}{\partial \chi} + \frac{\partial (\rho \vee_{\chi} \vee_{\chi})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \vee_{Z} \vee_{\chi})}{\partial z} = \rho g_{\chi} - \frac{\partial P}{\partial \chi}$$

$$+ R_{\chi} + \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{\chi}}{\partial \chi} \right) + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{\chi}}{\partial \gamma} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{\chi}}{\partial z} \right) + T_{\chi}$$
(7)

$$\frac{\partial \rho \vee_{y}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \vee_{x} \vee_{y})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \vee_{y} \vee_{y})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \vee_{z} \vee_{y})}{\partial z} = \rho g_{y} - \frac{\partial P}{\partial y} + R_{y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{y}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{y}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{y}}{\partial z} \right) + T_{y}$$
(8)

$$\frac{\partial \rho \vee_{z}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \vee_{x} \vee_{z})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \vee_{y} \vee_{z})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho \vee_{z} \vee_{z})}{\partial z} = \rho g_{z} - \frac{\partial P}{\partial z}$$
$$+ R_{z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{z}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{z}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{e} \frac{\partial \vee_{z}}{\partial z} \right) + T_{z}$$
(9)

Onde:

g_x, g_y, g_z = componentes de aceleração devido à gravidade

 ρ = densidade

 μ_e = viscosidade efetiva

 R_x , R_y , R_z = resistências distribuídas.

 T_x , Ty, T_z = termos de perdas viscosas

Para um caso laminar, a viscosidade efetiva é meramente a viscosidade dinâmica, uma propriedade do fluido. Os termos de R_x , R_y e R_z representam quaisquer termos de origem, que o usuário pode desejar adicionar.

Um exemplo é a resistência distribuída, utilizada para modelar o efeito de alguma característica geométrica sem modelar a sua geometria. Entre os exemplos disso está o fluxo através de telas e meios porosos.

Os termos T_x , T_y e T_z são termos de perdas viscosas que são eliminados no caso, constante, da propriedade incompressível. A ordem da diferenciação é invertida em cada termo, reduzindo o termo a uma derivada da equação de continuidade, que é zero.

$$T_{\chi} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_{\chi}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_{y}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_{z}}{\partial x} \right)$$
(10)

$$T_{y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_{x}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_{y}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_{z}}{\partial y} \right)$$
(11)

$$T_{Z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v_{\chi}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_{y}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_{z}}{\partial z} \right)$$
(12)

2.2.2.3 Equação da conservação de energia

A conservação de energia pode ser expressa em termos de estagnação total de temperatura, muitas vezes útil nos fluxos altamente compressíveis, ou de temperatura estática, apropriada para análises incompressíveis a baixa velocidade.

a) Equação da energia compressível

A equação da energia total é resolvida no caso compressível com a transferência de calor. Em termos da temperatura (ou estagnação) total, a equação de energia é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_{p}T_{0}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_{x}C_{p}T_{0}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_{y}C_{p}T_{0}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_{z}C_{p}T_{0}) =
\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial T_{0}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa\frac{\partial T_{0}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial T_{0}}{\partial z}\right) + W^{V} + E^{K} + Q_{V} + \Phi + \frac{\partial P}{\partial t}$$
(13)

Onde:

C_p = calor específico

To = temperatura (ou estagnação) total

K = condutividade térmica

 W^{v} = termo de trabalho viscoso

Q_v = fonte de calor volumétrica

 Φ = termo de geração de calor viscoso

 E^{k} = energia cinética

A temperatura estática é calculada da temperatura total a partir da energia cinética:

$$T = T_0 - \frac{v^2}{2C_p}$$
(14)

Onde:

T = temperatura estática

v = magnitude do vetor velocidade do fluido

As temperaturas estática e total para os nós sem fluido será a mesma.

Os termos W^v , $E^k e \Phi$ são descritos a seguir.

O termo do trabalho viscoso, usando a notação de tensor, é:

$$W^{V} = u_{j} \mu \left[\frac{\partial}{\partial x_{i}} \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{j}} \right]$$
(15)

Onde a repetição de um índice implica um somatório sobre as três direções ortogonais.

O termo da energia cinética é:

$$\mathsf{E}^{\mathsf{K}} = -\frac{\partial}{\partial \mathsf{x}} \left[\frac{\mathsf{K}}{\mathsf{C}_{\mathsf{p}}} \frac{\partial}{\partial \mathsf{x}} \left(\frac{1}{2} |\mathsf{v}^{2}| \right) \right] - \frac{\partial}{\partial \mathsf{y}} \left[\frac{\mathsf{K}}{\mathsf{C}_{\mathsf{p}}} \frac{\partial}{\partial \mathsf{y}} \left(\frac{1}{2} |\mathsf{v}^{2}| \right) \right] - \frac{\partial}{\partial \mathsf{z}} \left[\frac{\mathsf{K}}{\mathsf{C}_{\mathsf{p}}} \frac{\partial}{\partial \mathsf{z}} \left(\frac{1}{2} |\mathsf{v}^{2}| \right) \right]$$
(16)

E, finalmente, o termo de dissipação viscosa, em notação de tensor, é

$$\Phi = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_k}$$
(17)

No caso compressível adiabático, em que há ausência de transferência de calor, a equação 14 é usada para calcular a temperatura estática a partir da temperatura total especificada. b) Equação da energia incompressível

A equação da energia para o caso incompressível pode ser derivada a partir de um caso compressível, negligenciando o trabalho viscoso (W^v), o trabalho de pressão, a dissipação viscosa (f), e a energia cinética (E^k). À medida que a energia cinética é negligenciada, a temperatura estática (T) e a temperatura total (To) são as mesmas. A equação da energia agora toma a forma de uma equação de transporte térmico para a temperatura estática:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_{p}T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho V_{x}C_{p}T) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V_{y}C_{p}T) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho V_{z}C_{p}T)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial z}\right) + Q_{y}$$
(18)

2.2.2.4 Turbulência

O número de Reynolds de um fluxo dá uma medida da importância relativa das forças de inércia (associadas a efeitos convectivos) e das forças viscosas. Em experiências com sistemas de fluidos, observa-se que, com valores baixos do chamado número de Reynolds crítico, o fluxo é regular e as camadas adjacentes do fluido fluem umas sobre as outras de uma forma ordenada. Se as condições de contorno aplicadas não mudam com o tempo, o fluxo é constante e o regime é chamado de laminar.

Com valores acima do número de Reynolds crítico, acontece uma série complicada de eventos que eventualmente leva a uma mudança radical do comportamento do fluxo. No estado final, o comportamento do fluxo é aleatório e caótico, e o movimento torna-se intrinsecamente instável, mesmo com constantes condições de contorno impostas. A velocidade e todas as outras propriedades de fluxo variam de uma maneira aleatória e caótica. Esse regime é chamado fluxo turbulento.

Em outras palavras, o fluxo laminar é suave, regular, determinístico e estacionário (a menos que se definia uma simulação transitória) e o fluxo turbulento é aleatório, caótico, não determinista, e essencialmente instável devido às flutuações estatísticas. Para o fluxo laminar, a maioria dos códigos de CFD resolve a equação de

Navier-Stokes clássica e as equações de conservação de energia. Já para o fluxo turbulento, resolvem-se as formas das médias de Reynolds dessas equações.

Como já citado, com altos números de Reynolds observa-se o fluxo tornando-se turbulento, o que significa dizer que um estado complexo, caótico e aleatório de movimento desenvolve-se no qual a velocidade e a pressão mudam continuamente, com o tempo, dentro de regiões substanciais de fluxo.

Se os efeitos de inércia são grandes o suficiente para determinar os efeitos viscosos, o fluxo pode ser turbulento. Os fluxos turbulentos são caracterizados por campos de velocidade flutuantes. Essas flutuações (variações) misturam quantidades transportadas, como momentum e energia, e fazem com que tais quantidades transportadas variem também.

Uma vez que essas flutuações podem ser de pequena escala e de alta frequência, tornam-se demasiadamente difíceis e dispendiosas de se simular computacionalmente. Como alternativa, as equações instantâneas que governam o fluxo podem ser calculadas com base na média ao longo do tempo para remover as pequenas escalas, resultando em um conjunto modificado de equações que são menos dispendiosas, computacionalmente, de se resolver. No entanto, as equações modificadas contêm variáveis desconhecidas adicionais, e modelos de turbulência são necessários para determinar essas variáveis em termos de quantidades conhecidas.

Já que a turbulência significa que a velocidade instantânea é flutuante em cada ponto no campo de fluxo, a velocidade é, assim, expressa em termos de um valor médio e de um componente flutuante:

$$\nabla_{\mathbf{X}} = \overline{\nabla}_{\mathbf{X}} + \nabla_{\mathbf{X}}^{\prime} \tag{19}$$

Onde:

 \overline{V}_{χ} = Componente da média de velocidade na direção x

 v_{x} = Componente da variação de velocidade na direção x

Caso fosse gravado o comportamento da velocidade em um ponto particular de um fluido em um escoamento turbulento, real, a medição da velocidade instantânea iria apresentar-se como na Figura 6.



Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

Se uma expressão tal como essa é utilizada para a velocidade instantânea nas equações de Navier-Stokes, as equações podem então ser uma média temporal, notando que a média temporal do componente da variação é zero e a média ao longo do tempo do valor instantâneo é o valor da média.

O intervalo de tempo para a integração é escolhido arbitrariamente, porém deve ser longo o suficiente para que isso seja verdade e curto o suficiente para que os efeitos transitórios do "tempo real" não afetem essa integração.

$$\frac{1}{\delta_t} \int_0^{\delta_t} v_x' dt = 0; \quad \frac{1}{\delta_t} \int_0^{\delta_t} v_x dt = \overline{v}_x$$
(20)

Após a substituição da (19 nas equações dinâmicas, a média ao longo do tempo conduz a condições adicionais. As velocidades nas equações de momentum são as médias, logo a barra na expressão subsequente das equações de quantidade de movimento poderia ser suprimida, de modo que agora a ausência da barra significa o valor médio.

Os termos adicionais são:

$$\sigma_{X}^{R} = -\frac{\partial}{\partial x} (\overline{\rho v_{X} v_{X}}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{\rho v_{X} v_{y}}) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{\rho v_{X} v_{z}})$$
(21)

$$\sigma_{y}^{R} = -\frac{\partial}{\partial x} (\overline{\rho v_{y}' v_{x}'}) - \frac{\partial}{\partial v} (\overline{\rho v_{y}' v_{y}'}) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{\rho v_{y}' v_{z}'})$$
(22)

$$\sigma_{Z}^{R} = -\frac{\partial}{\partial x} (\overline{\rho v_{Z}^{'} v_{X}^{'}}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{\rho v_{Z}^{'} v_{y}^{'}}) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{\rho v_{Z}^{'} v_{z}^{'}})$$
(23)

Onde: σ^{R} = termo do tensor de Reynolds

Na abordagem da viscosidade turbulenta para o modelo de turbulência, colocamse essas condições para um termo de tensão viscosa com um coeficiente de viscosidade turbulenta desconhecida. Por exemplo:

$$-\overline{\rho \vee_{X} \vee_{y}} = \mu_{t} \frac{\partial \vee_{X}}{\partial y}$$
(24)

A principal vantagem dessa estratégia vem da observação de que a representação da σ^{R} tem exatamente a mesma forma que a dos termos de difusão nas equações originais. Os dois termos podem ser combinados se a viscosidade efetiva for definida como a soma da viscosidade laminar e da viscosidade turbulenta:

$$\mu_e = \mu + \mu_t \tag{25}$$

A solução para o problema de turbulência, em seguida, gira em torno da solução da viscosidade turbulenta.

Mesmo nos escoamentos nos quais a velocidade e pressão variam somente em uma ou duas dimensões do espaço, as variações turbulentas sempre têm um caráter espacial em 3D (três dimensões).

Além disso, visualizações de escoamentos turbulentos revelam estruturas rotacionais do fluxo; são os chamados vórtices turbulentos. Dentre as diferentes abordagens para tratar a turbulência, computacionalmente, destacam-se as seguintes:

a) Direct Numerical Simulation (DNS)

A abordagem DNS resolve numericamente as equações instáveis de Navier-Stokes, além de resolver todo o espectro de escalas e não requerer modelagem. Porém, seus custos e suas aplicações na indústria são impraticáveis.

Traduzindo esse tipo de tratamento de turbulência em tempo, demandar-se-iam meses de interações e cálculos computacionais até que fosse possível obter resultados satisfatórios, ou seja, convergentes. Na Figura 7 tem-se caracterizado o comportamento de um escoamento turbulento tratado pela abordagem DNS.



Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

b) Large Eddy Simulation (LES)

A abordagem LES resolve as equações da média espacial de Navier-Stokes. Por meio dela, os grandes vórtices são resolvidos diretamente, mas vórtices menores do que as malhas são modelados. Esse tipo de abordagem é menos caro do que a DNS, mas a quantidade de recursos computacionais e os esforços são ainda demasiado grandes para a maioria das aplicações práticas.

Traduzindo esse tipo de tratamento de turbulência em tempo, demandar-se-iam semanas de interações e cálculos computacionais até que fosse possível obter resultados convergentes. Na Figura 8 tem-se caracterizado o comportamento de um escoamento turbulento tratado pela abordagem LES.



Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

c) Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation (RANS)

A abordagem RANS resolve as equações da média temporal de Navier-Stokes e todas as escalas de comprimentos turbulentos são modeladas em RANS. Além disso, vários modelos diferentes estão disponíveis, o que torna essa a abordagem a mais utilizada para calcular os fluxos industriais.

Traduzindo esse tipo de tratamento de turbulência em tempo, demandar-se-iam no máximo algumas horas de interações e cálculos computacionais até que fosse possível obter resultados satisfatórios. Na Figura 9 tem-se caracterizado o comportamento de um escoamento turbulento tratado pela abordagem RANS.



Figura 9 - Escoamento turbulento retratado pela abordagem RANS

Fonte: Engineering Simulation and Scientific Software (6)

Isso deve-se ao fato de que, para a maioria das aplicações de engenharia, não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas, uma vez que o que se busca saber é como a turbulência afeta, na média, o fluxo. E a abordagem RANS tem

tudo o que um modelo de turbulência precisa ter para ser útil, que é: ser amplamente aplicado, preciso, simples e economicamente factível.

De acordo com o Manual Ansys (12) do CFX, os modelos *Reynolds Averaging* (RANS) são os que oferecem a abordagem mais econômica para os cálculos dos fluxos turbulentos complexos. Exemplos típicos de tais modelos são o k- ε ou o k- ω em suas diferentes formas. Esses modelos simplificam o problema por meio da solução de 02 (duas) equações de transporte e introduzem o conceito de viscosidade turbulenta para calcular as tensões de Reynolds.

Modelos RANS mais complexos estão disponíveis, no entanto são resolvidas equações, individuais, para cada um dos 06 (seis) tensores de Reynolds (modelo RSM - *Reynold Stress Model*), mais uma equação escalar (equação de ε ou equação de ω).

Conforme demonstrado na média de Reynolds (*Reynolds Averaging*), as variáveis das soluções instantâneas de Navier-Stokes são decompostas em médias temporais e componentes flutuantes, de forma geral representadas pela equação 26.

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{i} &= \overline{\mathcal{U}}_{i} + \mathcal{U}_{i}' \\ & \text{Componente Componente Stantâneo Média-Temporal Flutuação} \\ \end{aligned} \tag{26}$$

Da mesma forma, a equação 27 representa a pressão e outros escalares:

$$\phi = \overline{\phi} + \phi' \tag{27}$$

Onde Φ denota uma escalar como pressão, energia ou concentração de uma determinada espécie.

Substituindo as expressões dessa forma pelas variáveis do fluxo na continuidade instantânea e nas equações de momentum e tendo um tempo ou média, produzem-se as equações médias de momentum. Elas podem ser escritas na forma de tensor cartesiano como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \tag{28}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho u_{i}u_{j}) = -\frac{\partial p}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\mu \left(\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_{l}}{\partial x_{l}} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(-\rho \overline{u_{i}' u_{j}'} \right)$$
Tensor de
Revnolds
(29)

A equação 28 e a equação 29 são chamadas de equações RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes); elas têm a mesma forma geral das equações instantâneas de Navier-Stokes, com a velocidade e as outras variáveis de solução agora representando os valores da média temporal. Os termos adicionais aparecem, agora, representando os efeitos de turbulência. Os tensores de Reynolds devem ser modelados para fechar a equação 29.

Os modelos de turbulência mais difundidos são: k- ϵ , RNG k- ϵ , k- ω , Shear Stress Transport (SST) e Reynolds Stress Model (RSM). No modelo k- ϵ e suas extensões, a viscosidade turbulenta é calculada como uma função dos parâmetros de turbulência, energia cinética (k) e sua taxa de dissipação (ϵ) usando a equação 30. Nos modelos grupo de renormalização (RNG) e padrão, C μ é constante, ao mesmo tempo que varia em outros modelos.

$$\mu_t = C_{\mu} \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon}$$
(30)

Onde:

 C_{μ} = constante de turbulência

k = energia cinética turbulenta

ε = taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

Modelos de duas equações são historicamente os modelos de turbulência mais utilizados nos processos industriais com aplicação do CFD. Eles resolvem duas equações de transporte e modelam as tensões de Reynolds usando a abordagem de viscosidade turbulenta.

O modelo k-ε padrão enquadra-se nessa classe de modelos e se tornou o principal meio de cálculos dos fluxos aplicados na engenharia desde que foi proposto por Launder e Spalding (Manual Ansys) (12). Economia, robustez e razoável exatidão para uma vasta gama de fluxos turbulentos explicam a sua popularidade nas aplicações industriais e simulações de transferência de calor.

O ponto negativo de todos os modelos k-ε é a sua insensibilidade para com gradientes de pressão adversos e separação da camada limite. Eles tipicamente preveem uma separação retardada e reduzida em relação às observações práticas.

Isso pode resultar em avaliações de *design* excessivamente otimistas para os fluxos que se separam a partir de superfícies lisas (corpos aerodinâmicos, difusores etc.). O modelo k-ε não é, portanto, largamente utilizado em aerodinâmica externa.

O modelo k- ε padrão é baseado em equações do modelo de transporte para a energia cinética da turbulência (k) e sua taxa de dissipação (ε). O modelo da equação de transporte para k é derivado a partir da equação exata, enquanto o modelo da equação de transporte para ε foi obtido usando o raciocínio físico e tem pouca semelhança com o seu homólogo matematicamente exato.

Na derivação do modelo k-ε, a suposição é que o fluxo é totalmente turbulento, e os efeitos da viscosidade molecular são desprezíveis. O k-ε padrão é, portanto, válido apenas para escoamentos plenamente turbulentos.

Como os pontos fortes e fracos do modelo k-ɛ padrão tornaram-se conhecidos, modificações foram introduzidas para melhorar o seu desempenho. Duas dessas variantes são: o modelo RNG k-ɛ e o k-ɛ realizável.

A energia cinética da turbulência, k, e a sua taxa de dissipação, ε, são obtidas a partir das seguintes equações de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$
(31)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon\mu_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_i}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_1 \varepsilon \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_3 \varepsilon G_b) - C_2 \varepsilon \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$
(32)

Nessas equações, G_k representa a geração de energia cinética da turbulência, devido aos gradientes de velocidade média. G_b é a geração de energia cinética da turbulência devido à flutuabilidade. Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante da turbulência compressível para a taxa geral de dissipação. C_{1ε}, C_{2ε}, e C_{3ε} são constantes; σ_k e σ_{ϵ} são os números de Prandtl de turbulência para k e ϵ , respectivamente. S_k e S_ε são termos fonte definidos pelo usuário.

Na maioria dos softwares de CFD, o uso do modelo k-ε realizável é recomendado relativamente para as outras variantes da família k-ε. Recomenda-se utilizar o modelo k-ε em combinação com o tratamento de parede aprimorado.

52

No modelo de k-w e no modelo SST, a viscosidade turbulenta é calculada como:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \tag{33}$$

Aqui, ω é definida como:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{C_{\mu}k}$$
(34)

Onde:

 ω = taxa de dissipação específica

Resumindo, o modelo k-ɛ e suas extensões implicam a resolução de equações diferenciais parciais para a energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação, enquanto os modelos k-ômega e SST implicam a resolução de equações diferenciais parciais para a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação específica.

Usando o modelo RSM, cria-se um alto grau de acoplamento entre as equações de momentum e as tensões de turbulência no fluxo e, portanto, o cálculo pode ser mais propenso à estabilidade e a dificuldades de convergência do que quando utiliza-se o modelo k-ɛ.

Portanto, quando utilizado o RSM, pode ser necessário adotar estratégias especiais de solução, a fim de obter uma solução convergente. As seguintes estratégias são geralmente recomendadas:

 Comece os cálculos usando o modelo k-ε padrão. Então altere para o modelo RSM usando os dados da solução do k-ε como ponto de partida para o cálculo com RSM.

• Use baixos fatores de sob-relaxamento (0,2 a 0,3) e, para as soluções baseadas na densidade, um baixo número de Courant para fluxos com alto turbilhonamento (turbulência) ou fluxos de alta complexidade. Nesses casos, pode ser necessário reduzir os fatores de sob-relaxamento, tanto para os fatores de velocidade quanto para todos os fatores de tensão.

Na engenharia, muitos fluxos importantes envolvem turbilhonamento (*swirl*) ou rotação, e os códigos de CFD estão bem equipados para modelar tais fluxos.

Fluxos turbulentos são comuns em combustão, com um *swirl* introduzido em queimadores e câmaras de combustão a fim de aumentar o tempo de residência e estabilizar o padrão de fluxo.

Quando modela-se o fluxo turbulento com uma quantidade significativa de *swirl*, deve-se considerar o uso de modelos de turbulência avançados: o modelo RNG k- ε, o k- ε realizável, ou o RSM. A escolha apropriada depende da força da turbulência ou do turbilhonamento, que pode ser medido pelo número de *swirl*, que é definido como a razão entre o fluxo axial de momentum angular e o fluxo axial de momentum axial:

$$S = \frac{\int r w \vec{v} \cdot d\vec{A}}{\overline{R} \int u \vec{v} \cdot d\vec{A}}$$
(35)

Onde:

 \overline{R} = raio hidráulico

Para fluxos com fraco ou moderado número de *swirl* (S<0,5), tanto o modelo RNG k- ϵ quanto o k- ϵ realizável apresentam melhores rendimentos quando comparados com o modelo k- ϵ padrão.

Para fluxos com alto número de *swirl* (S> 0,5), o *Reynolds Stress Model* (RSM) é fortemente recomendado. Os efeitos da forte anisotropia da turbulência podem ser modelados com rigor apenas pela adaptação no RSM.

d) Modelo RNG k- ε

O modelo RNG k- ϵ foi calculado utilizando uma técnica estatística chamada de teoria do grupo de renormalização. É semelhante em forma ao modelo k- ϵ padrão, mas inclui os seguintes aprimoramentos:

 O modelo RNG tem um termo adicional na sua equação de ε, que melhora a precisão dos fluxos rapidamente tensos;

- O efeito do redemoinho (*swirl*) na turbulência está incluso no modelo RNG, melhorando a precisão para os fluxos turbulentos;
- A teoria RNG fornece uma fórmula analítica para números de Prandtl turbulentos, enquanto o k-ε padrão usa valores constantes especificados pelo usuário;
- Enquanto o k-ε padrão é um modelo de alto número de Reynolds, a teoria RNG fornece uma fórmula diferencial, analiticamente derivada, para a viscosidade efetiva que responde pelos efeitos do baixo número de Reynolds. O uso eficaz desse recurso, no entanto, depende de um tratamento adequado da região próxima à parede.

Essas características tornam o modelo RNG k-ε mais preciso e confiável para uma classe mais ampla de fluxos do que o modelo k-ε padrão.

O RNG baseado no modelo de turbulência k-ε é derivado das equações instantâneas de Navier-Stokes, utilizando uma técnica matemática chamada de métodos de "grupo de renormalização" (RNG). Os resultados analíticos de derivação resultam em um modelo com constantes diferentes das do k-ε padrão, e com termos e funções adicionais nas equações de transporte para k e ε.

e) Modelo k- ε realizável

O k-ɛ realizável difere do k-ɛ padrão de duas maneiras importantes:

- O modelo k-ε realizável contém uma formulação alternativa para a viscosidade turbulenta;
- Uma equação de transporte modificada para a taxa de dissipação ε foi derivada de uma equação exata para o transporte da média quadrática da flutuação da vorticidade.

O termo "realizável" significa que o modelo satisfaz certas restrições matemáticas sobre as tensões de Reynolds, de acordo com a física de escoamentos turbulentos. Nem o modelo k-ε padrão nem o modelo RNG k-ε são realizáveis.

Para compreender a matemática por trás do k-ε realizável, deve-se considerar a combinação da relação de Boussinesq (equação 36) e a definição de viscosidade turbulenta ou Eddy (equação 37) para obter a seguinte expressão para as tensões de Reynolds normal em um fluxo incompressível (equação 38):

$$-\rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}$$
(36)

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{37}$$

$$\overline{u^2} = \frac{2}{3}k - 2\nu_t \frac{\partial U}{\partial x}$$
(38)

Usando a equação 37 para $v_t \equiv \mu_t / \rho$, obtém-se o resultado de que a tensão normal, $\overline{u^2}$, que por definição é uma quantidade positiva, torna-se negativa, isto é, "não realizável", quando a tensão é grande o suficiente para satisfazê-la.

$$\frac{k}{\varepsilon} \frac{\partial U}{\partial x} > \frac{1}{3C_{\mu}} \approx 3.7 \tag{39}$$

Tanto o k-ε realizável quanto o RNG k-ε demonstraram melhorias substanciais em relação ao k-ε padrão para os fluxos cujas características incluem fortes curvaturas, vórtices e rotação.

Uma vez que o modelo ainda é relativamente novo, não está exatamente claro em quais instâncias o k-ε realizável consistentemente supera o modelo RNG. No entanto, os estudos iniciais mostraram que o modelo de k-ε realizável fornece o melhor desempenho de todas as versões do modelo k-ε para validações de diversos fluxos separados e fluxos com complexas características de fluxo secundário.

f) Reynolds Stress Model (RSM)

Modelos de turbulência de duas equações (base dos modelos k- ω e k- ϵ) oferecem boas previsões das características e da física da maioria dos fluxos de relevância industrial. Em fluxos nos quais os efeitos do transporte turbulento ou em

desequilíbrio são importantes, a hipótese de viscosidade turbulenta não é mais válida e os resultados de modelos de viscosidade turbulenta podem ser imprecisos.

O *Reynolds Stress Model* (RSM) ou *Second Moment Closure* (SMC) naturalmente incluem os efeitos da curvatura das correntes, de mudanças bruscas na taxa de deformação e dos fluxos secundários ou de flutuação em relação a modelos de turbulência usando a aproximação de viscosidade turbulenta.

Pode-se considerar o uso do *Reynolds Stress Model* nos seguintes tipos de fluxo:

- Fluxo cisalhante com anisotropia forte, como um componente de forte turbulência. Isso inclui fluxos em fluidos rotativos;
- Fluxos com mudanças bruscas na taxa de deformação;
- Fluxos em que os campos de deformação são complexos, e reproduzem a natureza anisotrópica da turbulência em si;
- Fluxos com correntes com forte curvatura;
- Fluxo secundário;
- Fluxo flutuante.

Nesses casos, os modelos RSM têm mostrado desempenho superior em comparação com os modelos baseados na viscosidade turbulenta. Essa é a principal justificativa para os RSM, que são baseados em equações de transporte para os componentes individuais do tensor de tensão de Reynolds e da taxa de dissipação. Esses modelos são caracterizados por um maior grau de universalidade.

O ponto contra dessa flexibilidade é o alto grau de complexidade do sistema matemático resultante. O aumento do número de equações de transporte leva a uma redução da robustez numérica, exige um esforço computacional e, muitas vezes, impede o seu uso em fluxos complexos.

Teoricamente, os modelos de *Reynolds Stress* são mais adequados para fluxos complexos; no entanto, a prática mostra que eles não são muitas vezes superiores aos modelos baseados em duas equações como é o caso do k- ϵ e do k- ω . Um exemplo disso é a aplicação no caso de camadas de cisalhamento para parede delimitadas,

apesar do seu grau de universalidade teoricamente superior aos resultados mostram-se muitas vezes inferiores.

g) Modelo *shear-stress transport (*SST)

O modelo *shear-stress transport* (SST) foi desenvolvido por Menter, segundo o Manual Ansys (12), para misturar de forma eficaz a formulação robusta e precisa do modelo k- ω na região próxima à parede com a independência do fluxo livre do modelo k- ϵ na região distante da parede. Para alcançar esse objetivo, o modelo k- ϵ é convertido numa formulação k- ω . O modelo SST é semelhante ao k- ϵ padrão, mas inclui os seguintes refinamentos:

- O modelo k-ω padrão e modelo k-ε transformado são ambos multiplicados por uma função de mistura e ambos os modelos são somados. A função de mistura é designada para ser uma na região próxima à parede, que ativa o k-ω padrão, e outra para longe da superfície, que ativa o k-ε transformado;
- O modelo SST incorpora um termo derivativo da difusão cruzada amortecida na equação de ω;
- A definição da viscosidade turbulenta é modificada para conter o transporte das tensões de cisalhamento turbulentas;
- As constantes do modelo são diferentes.

Essas características tornam o modelo SST mais preciso e confiável para uma classe mais ampla de fluxos do que o modelo k-ɛ padrão, como pode ser notado na Figura 10.



Figura 10 – Comparativo entre modelos de turbulência (k-ɛ / k-ω / SST) e dados experimentais

No Quadro 1, encontra-se um resumo de tudo o que já foi visto sobre os diferentes tipos de modelos de turbulência, e são apresentados a descrição, o comportamento característico e a aplicabilidade de cada um dos principais modelos até agora citados.

Quadro 1 – Comparação entre os principais modelos de turbulência aplicados em CFD				
Modelo	Descrição	Comportamento e aplicação		
k-ε padrão	A linha de base do modelo é de duas	Robusto. Amplamente utilizado,		
	equações de transporte solucionadas	apesar das conhecidas limitações		
	para k e ε. Esse é o padrão para o	do modelo. Baixa performance		
	modelo do tipo k-ε. Os coeficientes	para os fluxos complexos		
	são empiricamente derivados; válido	envolvendo severo gradiente de		
	apenas para escoamentos totalmente	pressão, separação, forte		
	turbulentos. Opções para considerar	curvatura da corrente. Adequado		
	aquecimento viscoso, flutuabilidade e	para iterações iniciais,		
	compressibilidade são	detalhamento inicial de alternativas		
	compartilhadas com outros modelos	de projetos, e estudos		
	k-ε.	paramétricos.		
RNG- k-ε	Uma variação do modelo k-ε padrão.	Indicado para fluxos cisalhantes		
	Equações e coeficientes são	complexos que envolvem rápida		
	analiticamente derivados. Mudanças	tensão, moderado <i>swirl</i> , vórtices, e		
	significativas na equação ε melhoram	fluxo transitório local (por exemplo,		
	a capacidade para modelar fluxos	separação da camada limite,		
	altamente turbulentos. Opções	separação em massa, vórtices		
	adicionais de ajuda na previsão de	atrás de corpos, ventilação de		
	swirl e fluxos de baixo número de	ambientes).		
	Reynolds.			

				055
uadro 1 – Comparaça	o entre os princip	ais modelos de turb	pulencia aplicados	em CFD

(continua)

(continuação)

Modelo	Descrição	Comportamento e aplicação
K-ω padrão	Também um modelo de duas	Desempenho superior para
	equações de transporte solucionadas	camada limite, cisalhamento livre e
	para k e ω , este é o padrão dos	fluxos com baixo número de
	modelos do tipo k-ω. Demonstra	Reynolds. Adequado para fluxos
	desempenho superior para camada	com camada limite complexa sob
	limite e fluxos com baixo número de	adverso gradiente de pressão e
	Reynolds. Apresenta potencial para	separação (aerodinâmica externa
	predizer transição. Opções para	e turbomáquinas). Pode ser usado
	considerar transição, cisalhamento	para os fluxos de transição
	livre e escoamentos compressíveis.	(embora tenda a prever transição
		precoce). A separação é
		normalmente prevista para ser
		excessiva e precoce.
SST	Uma variação do modelo k-ω padrão.	Oferece benefícios semelhantes
	Combina o modelo k-ω padrão para	ao modelo k-ω padrão.
	uso perto das paredes e o modelo k-ε	Dependência da distância da
	padrão para longe das paredes,	parede faz dele menos adequado
	usando uma função de mistura.	para fluxos de cisalhamento livre.
	Também limita a viscosidade	
	turbulenta para garantir que $T_T \sim k$.	
	As opções de transição e	
	cisalhamento são extraídas do k-ω	
	padrão. Nenhuma opção para incluir	
	compressibilidade.	

(continua)

(continuação)

Modelo	Descrição	Comportamento e aplicação
RSM	Tensores de Reynolds são resolvidos	Fisicamente, na maioria dos
	diretamente usando equações de	chamados modelos RANS. Evita
	transporte, evitando considerações	considerações (suposições) da
	de viscosidade isotrópica de outros	viscosidade turbulenta isotrópica.
	modelos. Usado para fluxos	Mais tempo de CPU e memória
	altamente turbulentos. Opção de	requerida. Mais difícil de convergir.
	pressão de deformação quadrática	Adequado para complexos fluxos
	melhora o desempenho para muitos	em 3D com forte curvatura das
	fluxos básicos de cisalhamento	correntes, forte swirl / rotação (por
		exemplo, dutos curvados, fluxo
		rotacional passagens,
		queimadores com difusor e
		turbulência muito grande na
		entrada, ciclones).

Fonte: Manual Ansys (12)

2.2.2.5 Modelo de combustão

O modelo de combustão conhecido como *Eddy Dissipation Model* (EDM) foi desenvolvido para ser utilizado em uma vasta gama de fluxos turbulentos de reação, englobando as chamas do tipo pré-mistura e difusivas. Por causa da sua simplicidade e robustez em prever fluxos turbulentos de reação, esse modelo vem sendo amplamente utilizado para modelar sistemas de combustão industriais.

O modelo EDM é baseado no conceito de que a reação química é mais rápida em relação aos processos de transporte no escoamento, e logo não há controle da cinética no processo de reação. Assim, a ignição e os processos em que a cinética química pode limitar a taxa de reação podem ser mal previstos. Por padrão, para o modelo de dissipação de Eddy, é suficiente que o combustível e o oxidante estejam disponíveis no volume de controle para a combustão ocorrer.

62

Quando os reagentes se misturam em nível molecular, eles instantaneamente formam produtos. O modelo assume que a taxa de reação pode ser diretamente relacionada com o tempo necessário para misturar os reagentes, em nível molecular.

Em fluxos turbulentos, esse tempo de mistura é dominado pelas propriedades de turbilhonamento e, portanto, a taxa é proporcional a um tempo de mistura definido pela energia cinética turbulenta, k, e a dissipação ε.

rate
$$\infty \frac{\varepsilon}{k}$$
 (40)

Esse conceito de controle de reação é aplicável em muitos problemas de combustão industriais, nos quais as taxas de reação são rápidas em comparação com as taxas de mistura de reagentes. No modelo EDM, a taxa de progresso de reação elementar k é determinada pelo menor valor entre as duas expressões seguintes:

Limitador de reagentes

$$R_k = A \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{[I]}{v'_{kI}}\right) \tag{41}$$

Onde [I] é a concentração molar do componente I e I apenas inclui os componentes reagentes.

Limitador de produtos

$$R_{k} = A B \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum P(I) W_{I}}{\sum P'_{kI} W_{I}} \right)$$
(42)

Onde P faz um loop sobre todos os componentes do produto na reação elementar k.

Se o limitador de produto é ativado, definindo o parâmetro do coeficiente B da dissipação de Eddy como positivo na configuração do CFD, então os produtos também devem estar disponíveis. O limitador de produtos é desativado quando o coeficiente B está definido para um valor negativo.

Tanto para o esquema de reação de etapa única quanto para o o de multietapas, o limitador é desativado por padrão (B= -1), mas pode ser ativado ao ajustar-se explicitamente o coeficiente B do modelo para um valor positivo, embora isso não seja recomendado para esquemas de reação de multietapas.

Todavia, os produtos de combustão não podem ser sempre especificados como um dado de entrada (*input*). Nesse caso, os produtos não podem formar-se a menos que sejam introduzidos no domínio.

Assumindo-se tratar de um problema em que uma chama estável pode ser estabelecida, a especificação inicial de produtos dentro do domínio deve ser suficiente para iniciar e manter a combustão. No entanto, se a combustão é difícil de manter, pode ser necessário introduzir uma pequena fração de produtos a uma entrada (*inlet*).

2.2.2.6 Modelo de radiação

A radiação térmica é uma radiação eletromagnética que surge como resultado da diferença de temperatura entre a superfície de um corpo e a região do seu entorno (Engineering Simulation and Scientific Software) (6).

As elevadas temperaturas de operação do combustor implicam alta taxa de transferência de calor por radiação, a qual é proporcional à quarta potência da temperatura.

Uma aproximação adotada foi a atribuição de superfície difusa no interior do combustor, onde as intensidades da radiação refletida ou da emitida são uniformemente redistribuídas, seja qual for a natureza ou a direção da radiação incidente.

A radiação térmica é a emissão de energia por meio de ondas eletromagnéticas e as suas principais características são:

- Quando algum objeto está acima do zero absoluto, ele vai começar a emitir e absorver energia;
- Dependência espectral das propriedades dos materiais radiativos;
- Pode ocorrer em condições de vácuo.

64

Efeitos de radiação devem ser considerados quando a taxa de transferência de calor por radiação (Qrad) é de magnitude igual ou maior do que as taxas de transferência de calor por convecção e condução.

$$Q_{rad} = \sigma \left(T_{\max}^4 - T_{\min}^4 \right) \ge Q_{conv} = h \left(T_{wall} - T_{free} \right)$$
(43)

A espessura óptica Ξ (a+ $\sigma_{s})L$ deve ser determinada antes de se escolher o modelo de radiação.

Onde:

a= coeficiente de absorção (m⁻¹)

 σ_{s} = coeficiente de dispersão (geralmente = 0)

L = distância típica entre 02 (duas) paredes opostas (m)

Espessuras ópticas finas significam que o fluido é transparente para a radiação a comprimentos de onda nos quais a transferência de calor ocorre, ou seja, a radiação apenas interage com os limites do domínio. Já as espessuras ópticas espessas significam que o fluido absorve e reemite a radiação.

Para as espessuras opticamente espessas, o modelo P-1 é uma boa escolha. Muitas simulações de combustão caem nessa categoria, pois os gases de combustão tendem a absorver a radiação e os modelos P-1 dão uma precisão razoável, sem muito esforço computacional.

O modelo de radiação P-1 é o caso mais simples do modelo mais geral, P-N, o qual é baseado na expansão da intensidade de radiação (I) em uma série ortogonal de harmónicas esféricas (Manual Ansys) (12).

Ao modelar a radiação num corpo cinza, a seguinte equação é obtida para o fluxo de radiação q_y se apenas quatro termos na série são usados:

$$q_{\gamma} = -\frac{1}{3(a+\sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G \tag{44}$$

Onde:

 α = coeficiente de absorção

 σ_s = coeficiente de dispersão

G = radiação incidente

C = coeficiente linear anisotrópico da função de fase, descrito a seguir.

Após a introdução do parâmetro...

$$\Gamma = \frac{1}{\left(3\left(\alpha + \sigma_{s}\right) - C\sigma_{s}\right)} \tag{45}$$

...a equação 44 é simplificada para:

$$q_{\gamma} = -\Gamma \,\nabla G \tag{46}$$

A equação de transporte para G é:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - aG + 4an^2 \sigma T^4 = S_G \tag{47}$$

Onde

n = índice de refração do meio

 σ = constante de Stefan-Boltzmann

 S_G = uma fonte de radiação definida pelo usuário do código CFD

O software da Ansys utilizado resolve essa equação para determinar a intensidade da radiação local quando o modelo P-1 está ativo.

A combinação das equações 46 e 47 resulta em:

```
-\nabla \cdot q_r = aG - 4an^2 \sigma T^4
```

(48)

A expressão $-\nabla \cdot q_r$ pode ser diretamente substituída na equação de energia para expressar as fontes de calor (ou dissipadores) devido à radiação.

O código CFD aqui utilizado também permite a modelagem de radiação não cinzenta utilizando um modelo *gray-band*. Para radiação não cinzenta, a equação 47 é reescrita como:

$$\nabla \cdot (T_{\lambda} \nabla G_{\lambda}) - a_{\lambda} G_{\lambda} + 4 a_{\lambda} n^2 \sigma T^4 = S_{G\lambda}$$
⁽⁴⁹⁾

Onde:

*G*_λ = radiação espectral incidente a_λ = um coeficiente de absorção espectral

n = índice de refração do meio

 $S_{G\lambda}$ = um termo fonte definido pelo usuário

 σ = constante de Stefan-Boltzmann.

Τλ é definido como:

$$\Gamma_{\lambda} = \frac{1}{(3(\alpha_{\lambda} + \sigma_{s\lambda}) - C\sigma_{s\lambda})}$$
(50)

Onde:

 $\sigma_{S\lambda}$ = um coeficiente de espalhamento espectral

C = coeficiente linear anisotrópico da função de fase.

A emissão espectral do corpo negro (G_{b₁}) entre comprimento de onda \imath_1 e \imath_2 é dada como:

$$G_{b\lambda} = 4 \left[F(0 \to n\lambda_2 T) - F(0 \to n\lambda_1 T) \right] \sigma T^4$$
(51)

Onde F $(0 \rightarrow n_{\lambda}T)$ é a fração de energia radiante emitida por um corpo negro no intervalo de comprimento de onda de 0 a λ à temperatura T num meio de índice de refração, e n λ_1 , λ_2 são os limites de comprimento de onda da banda.

O fluxo radiativo espectral é calculado como:

$$q_{\lambda} = -\Gamma_{\lambda} \nabla G_{\lambda} \tag{52}$$

O termo fonte da radiação na equação de energia é dado como:

$$-\nabla q_{r} = \sum_{\text{All Bands}} -\nabla q_{r,\lambda} = \sum_{\text{All Bands}} a_{\lambda} (G_{\lambda} - n^{2} G_{b\lambda})$$
(53)

As equações de 2 a 53 podem ser encontradas no Manual Ansys (12), com exceção da equação 43, que foi extraída de Engineering Simulation and Scientific Software (6).

2.3 ESTUDOS REALIZADOS COM CFD APLICADO EM SISTEMAS DE COMBUSTÃO

Como os modelos não têm generalidade, baseando-se usualmente em dados experimentais, pesquisou-se, na literatura, quais seriam os modelos, as características e as demais condições que melhor representariam o sistema de combustão do combustor de ar em uma simulação com CFD.

Uma das grandes dificuldades remeteu-se ao número reduzido de trabalhos envolvendo a aplicação em larga escala do CFD em sistemas de combustão industriais, conforme alertado por Castiñeira e Edgar (13).

Um grande número de autores cita Baukal Jr. e Charles (14) como sendo uma referência nesse assunto e ratifica que a maior dificuldade na simulação de um sistema de combustão está claramente relacionada à alta turbulência desse tipo de aplicação.

Devido à ampla gama de escalas de tempo e comprimento, não é possível uma simulação numérica direta do fluxo turbulento, sendo necessária a utilização de algum modelo de turbulência para descrever tal comportamento.

Adicionalmente, tem-se a dificuldade em descrever, realisticamente, os mecanismos químicos das reações de combustão através de uma única equação. Alguns modelos de combustão podem incluir dezenas de espécies e centenas de reações, isso para aqueles combustíveis mais utilizados e consequentemente mais conhecidos e estudados, o que geralmente torna necessário trabalhar com simplificações químicas.

Além disso, se faz necessário lidar com complexas interações entre turbulência e reações químicas, devido à sensibilidade das taxas de reação às alterações do meio. Por esses motivos, a malha escolhida para rodar simulações não tem normalmente capacidade para suportar a exigência de capturar todos os detalhes da combustão.

Saario et al. (15), a exemplo de Barreiros et al. (16), usaram o CFD para simular em um forno cilíndrico, em escala de laboratório, as principais semelhanças com a simulação do combustor de ar que devem ser ressaltadas: (i) a presença de fuligem devido ao tipo de combustível e (ii) as dificuldades inerentes à modelagem de um sistema de combustão.

Dentre as dificuldades também se destacam a definição do modelo de turbulência e a transferência de calor por radiação, além dos demais fenômenos não menos complexos que envolvem a combustão do BPF, que são a atomização e a dispersão (spray) do combustível.

Quando se fala em spray de óleo, associa-se a evaporação e combustão das gotas de combustível. Pela sua importância, esse assunto vem sendo extensivamente investigado. Segundo Barreiros et al. (16), a velocidade inicial e o tamanho das gotas de óleo são pontos cruciais para uma boa simulação em CFD.

No estudo de Saario et al. (15), tanto o modelo de turbulência k-ε padrão quanto o modelo de *Reynolds Stress* (RSM) foram testados. As trajetórias das gotas de óleo BPF foram previstas pela resolução de equações de momentum usando o tratamento de Lagrange. O modelo de combustão foi baseado na abordagem prescrita da função de probabilidade de densidade ou simplesmente PDF. que é a abreviação do inglês *Probability Density Function*.

Outra grande similaridade entre o trabalho de Saario et al. (15) e esta tese refere-se ao queimador; ambos são constituídos de uma "pistola" central por onde o óleo combustível é injetado e entra o fornecimento de ar.

No queimador do combustor, o ar primário é utilizado também para manter a "camisa" do queimador refrigerada, evitando com isso o maior desgaste do queimador por temperatura. No laboratório, Saario et al. (15) utilizou a água como fluído refrigerante. Uma diferença entre os dois queimadores deve-se ao fluido utilizado para atomização. No combustor utiliza-se vapor, enquanto no laboratório optou-se por ar comprimido. Porém em ambos os casos existe um difusor *swirl* responsável por gerar um redemoinho no ar, gerando com isso uma maior turbulência na região próxima ao bico do queimador.

Por questões práticas, medir a distribuição do tamanho das gotas próximas ao bico do queimador é inviável, bem como definir a velocidade do fluido de atomização, o que torna complicada a tarefa de definir condições de contorno adequadas, tanto para as gotas quanto para a atomização na saída do queimador. Por esse motivo, optou-se pela malha hexaédrica, usando uma malha mais fina na região próxima ao queimador e uma malha menos refinada ao longo do corpo cilíndrico.

Pode-se constatar que a acurácia do modelo k-ε é limitada para fluxos com alta turbulência, neste caso provocada pelo difusor. Tal imprecisão deve-se às considerações adotadas pelos modelos do tipo "ε-equation" e pela consideração da viscosidade turbulenta isotrópica. Por esses motivos, o modelo k-ε não proporciona uma estimativa satisfatória para o fluxo quando a chama é proveniente da queima de óleo BPF.

Já o modelo RSM, por resolver as equações de transporte por meio dos tensores de Reynolds (*Reynolds Stress*), demostrou uma melhor predição, mesmo ainda apresentando uma certa discrepância na região próxima ao queimador.

Castiñeira e Edgar (13) também demonstraram que o modelo K- ε não é o mais indicado para aplicações em regiões com grande turbulência, como é o caso das regiões próximas ao queimador, e que nessas regiões a malha tem que ser mais refinada.

Furuhata et al. (17) reforçam o time de pesquisadores que enaltecem a importância do uso da modelagem em CFD como ferramenta primordial para o desenvolvimento de otimizações em sistemas de combustão, tanto que a usou no trabalho em que foi simulado um combustor, com o objetivo de examinar a performance da queima de óleo BPF pulverizado através de um queimador. Constatou quão importantes são as escolhas dos modelos utilizados na simulação, bem como as considerações para obter a precisão desejada.

No estudo da performance do combustor, o modelo de turbulência adotado foi o K-ε. O comportamento das gotas de óleo, consideradas como esferas perfeitas, foi calculado pelo método de Lagrange. Já a taxa de combustão foi estimada pelo modelo de dissipação de Eddy. Os efeitos de radiação foram determinados pelo modelo "Six-Flux" e Simple foi o algoritmo utilizado para resolver as interações das equações que governam o sistema. As características do fluxo de gás nos limites da parede foram estimadas usando o modelo de função de parede e a velocidade do ar; a temperatura e a composição do gás foram informadas com base em dados experimentais, ou seja, dados de campo.

E mais uma vez o modelo de turbulência k-ε mostrou-se pouco preciso para aplicações em sistemas de combustão nos quais o combustível é o óleo BPF pulverizado, ou seja, atomizado. Isso acarretou uma alta turbulência na região do queimador.

Liu et al. (18), por meio de simulação em CFD, detalharam o comportamento de um forno a fim de obter as condições ideais de operação e observar o mais razoável e eficiente processo de combustão. Em termos de modelos matemáticos, optaram por usar o modelo k- ϵ para turbulência, uma vez que o consideraram como sendo um modelo com desejáveis propriedades de robustez, além de ser amplamente usado. Já para a combustão, o modelo adotado foi o β *-Function* PDF, a fim de incluir os efeitos intermediários das espécies e as reações de dissociação, produzindo com isso uma predição mais realista da temperatura da chama.

E, como para sistemas de combustão e geometrias complicadas o modelo de radiação P-1 trabalha consideravelmente bem, foi o adotado na modelagem. Para obtenção da malha do forno, usou-se o método T-GRID. Nas condições de contorno a parede foi considera como estacionária e com a constante de rugosidade igual a 0,5. Além disso, adotou-se a técnica de volume de controle para resolver as equações integrais para a conservação de massa, energia e momentum, bem como as outras escalares como as de turbulência e espécies químicas. Em termos de erro residual, o grau de liberdade utilizado na simulação foi de 10⁻³, por ele ser considerado satisfatório para a análise.

Observou-se que através da troca de calor com o produto, sob alta temperatura, o ar de entrada é pré-aquecido, e essa elevação na temperatura do ar implica um aprimoramento da eficiência da reutilização do calor e, consequentemente, a redução do custo com combustível.

Em contrapartida observou-se também que, com o aumento de temperatura do ar de combustão, não aumenta só a economia de energia, mas também a emissão de NOx, o que em termos ambientais é bastante negativo.

Nessa mesma linha de raciocínio, Wu, Chang e Chiao (19) estudaram a combustão em escala de teste do óleo BPF em um forno com o ar de combustão sob alta temperatura. Essa configuração muito se assemelha à do combustor de ar: ao mesmo tempo buscou-se reduzir as emissões de dióxido de carbono (CO₂) e os custos com energia. A grande motivação do estudo é a forte exigência que os países industrializados estão sofrendo para reduzir as emissões dos gases de combustão e ao mesmo tempo reduzir os custos através do menor consumo de combustível.

Um caminho que vem se mostrando promissor, apesar do reduzido número de estudos na área, é a utilização de altas temperaturas do ar de combustão. Entretanto, entre os poucos estudos que vêm sendo feitos, a maioria foca no uso do gás natural ou do óleo combustível leve, havendo ainda pouquíssimos estudos com a aplicação do óleo combustível pesado (BPF). Wu, Chang e Chiao (19) ressaltaram que, naturalmente, o mecanismo de combustão com altas temperaturas é mais instável; uma característica que melhora, ou seja, reduz a formação de NOx é um melhor ajuste no tamanho das gotas de óleo através da atomização.

De forma semelhante à geometria do combustor aqui retratado, o equipamento estudado por Zarnescu e Pisupati (20) é constituído pelo queimador no topo e nele a zona de combustão desenvolve-se ao longo de um corpo cilíndrico. A grande diferença se dá pelo tipo de combustível utilizado, que no caso do experimento foi o carvão pulverizado e não o BPF. Zarnescu e Pisupati (20), sabendo que o modelo de turbulência é bastante influenciado pelas condições de contorno adotadas, optou pelo modelo k-ε para turbulência, enquanto o modelo de combustão foi o PDF associado ao modelo de radiação P-1, que é o mais simples entre os modelos do tipo P-N.
Em termos gerais, a simulação conduzida por Zarnescu e Pisupati (20) foi bemsucedida, uma vez que possibilitou avaliar o impacto na temperatura dos gases com a variação da emissividade da parede do combustor, bem como a variação do nível de intensidade da turbulência e o grande impacto que a mudança no tipo de combustível provoca na emissão de NOx.

Chacón, Sala e Blanco (21) desenvolveram uma nova metodologia a fim de aplicar em projetos e otimizações dos chamados queimadores de baixo NOx. Não se trata de um conceito recente, haja vista que desde a década de 1970 a atenção para o desenvolvimento de tecnologia para controlar as emissões, principalmente, dos óxidos de nitrogênio e de enxofre (SOx), os chamados precursores da chuva ácida, vem crescendo.

Os chamados queimadores de baixo NOx surgiram para atender ao grande conflito que a indústria enfrenta, que é o de poder trabalhar com altas temperaturas no ar de combustão, o papel principal do combustor, a fim de reduzir os custos de produção sem que isso signifique alta formação e, consequentemente, emissão de óxidos de nitrogênio.

Por tratar-se de um queimador experimental a gás natural, Chacón, Sala e Blanco (21), na simulação em CFD para retratar o comportamento da turbulência, aplicou o modelo k-ε padrão, que tornou-se bastante popular em simulações de transferência de calor aplicadas na indústria. Isso devido à sua robustez, economia e razoável precisão para uma grande variedade de fluxos turbulentos.

Como a transferência de calor por radiação é a predominante, optou-se pelo modelo P-1. Já para a combustão, o modelo adotado foi o *Probability Density Function* (PDF), e a malha hexaédrica foi a usada porque ofereceu os melhores resultados e também porque os erros associados com a difusão numérica foram menores com ela.

Mais uma vez, graças à escolha dos modelos menos refinados para esse tipo de aplicação, uma vez que os resultados foram satisfatórios dentro do grau de precisão que se buscava, observou-se uma pequena e já esperada diferença na temperatura máxima de combustão. Isso porque o modelo utilizado, como bem se sabe, superestima os valores de temperatura que na prática atingiriam valores ligeiramente menores na câmara de combustão.

E, como em todo trabalho que se propõe a estudar e desenvolver modelos cinéticos para combustão através de simulações em CFD, as corriqueiras e usuais simplificações aplicadas, por envolverem manipulação de multivariáveis, podem ocasionar resultados menos precisos que os observados na prática.

Andersen et al. (22) também defendem que o CFD tornou-se uma importante ferramenta para "*trouble-shooting*" e otimização. Entretanto, quando a técnica de fluidodinâmica computacional é aplicada para simular sistemas industriais de combustão, uma série de limitações computacionais são encontradas. Por essa razão, frequentemente se faz necessário aplicar mecanismos de reações simplificadas, a fim de reduzir os esforços computacionais.

No trabalho de Andersen et al. (22) sobre o mecanismo global de combustão para uso de modelos em CFD, sob condições de queima com O₂ (oxigênio) puro e combustível, eles puderam constatar que o modelo popular de interação químicaturbulenta *Eddy Dissipation Concept* (EDC), no qual assume-se que as reações químicas ocorrem nas finas estruturas das células computacionais, é recomendado.

O modelo de combustão de uma unidade para produção de cimento, estudado por Fidaros et al. (23), vem juntar-se a diversos outros trabalhos que utilizaram o modelo k-ε para descrever a turbulência em sistemas de combustão. Nesse caso, o objetivo era desenvolver um modelo capaz de descrever o comportamento dos variados perfis de velocidade e temperatura dos gases. O modelo baseou-se na solução das equações de Navier-Stokes para o fluxo de gás e na dinâmica de Lagrange para as partículas discretas, através do CFD. O tipo de malha usada foi a híbrida.

O que pôde-se observar com o trabalho de Fidaros et al. (23) foi que nas regiões onde observou-se uma maior concentração de sólidos as temperaturas tendiam a apresentar-se mais baixas em decorrência da alta absorção de calor por parte dos sólidos. E que as altas temperaturas nas regiões de mais altas velocidades ocorriam principalmente devido à alta concentração de queima de combustível e à ausência de partículas sólidas.

Esse paralelo de altas temperaturas pode ser extrapolado para o caso do combustor de ar, no qual observam-se altas velocidades, altas concentrações de queima de combustível e baixa concentração de sólidos.

Stefanidis et al. (24) utilizaram a simulação em CFD para detalhar os mecanismos de combustão (fluxo, temperatura e concentração) na seção de radiação de um forno em um processo de craqueamento a vapor, em petroquímicas. O modelo de combustão utilizado foi o EDC-DRK, ou seja, a combinação do *Detail Reaction Kinetics* (DRK) com o modelo de interação química-turbulenta baseado no *Eddy Dissipation Concept* (EDC). Ele foi escolhido por tratar-se de um modelo mais avançado e complexo de combustão turbulenta e por já ter sido aplicado com sucesso no passado em sistemas de combustão com e sem pré-mistura. Devido à escolha de um modelo de turbulência.

O objetivo de Stefanidis et al. (24) era investigar se as interações químicasturbulentas e os detalhes do efeito químico no modelo da chama do forno de craqueamento tinham influência na evolução de perfis de importantes variáveis, tais como temperatura da parede, temperatura do gás e concentração das espécies, bem como obter um conceito claro da estrutura da chama. Por esse motivo, optou-se pelo uso de células tetraédricas para discretizar o espaço físico próximo às paredes do forno e para a região da chama, próxima aos queimadores, e utilizou uma malha mais refinada. Mas, diferentemente do caso do combustor de ar, ele trabalhou com um perfil de temperatura do gás de processo fixo.

Comparando-se os resultados obtidos por Stefanidis et al. (24) quando utilizaram modelos menos sofisticados para descrever a cinética e a combustão, pode-se comprovar que os modelos mais sofisticados devem ser os utilizados sob condições normais de queima, por proporcionarem melhores resultados.

Kim e Kim (25) estudaram um sistema de combustão que emprega a combustão turbulenta a partir de uma mistura prévia do combustível e do ar enriquecido com oxigênio. Concluíram que a chama enriquecida com O₂ é mais quente. Entretanto, o comprimento da chama é de 40% a 10% menor na combustão que usa apenas ar como comburente, que é o caso do combustor de ar. Outra observação feita refere-se à largura da chama; comprovou-se que, quando o combustível é injetado com velocidade menor que 15 m/s, a largura da chama enriquecida é ligeiramente maior.

75

Esse tipo de combustão, enriquecida, vem ganhando bastante popularidade nas produções industriais de vidro, alumínio, ferro e aço, devido às suas vantagens inerentes: alta eficiência de combustão, baixo volume de gases de exaustão, baixo consumo de combustível, alta capacidade de derretimento e baixa emissão de NOx.

Guahk et al. (26), através de uma investigação experimental, buscaram demonstrar as características que influenciam no comportamento turbulento ou instável da chama, mostrando que tal instabilidade convectiva da chama laminar é produzida pela instabilidade de Kelvin-Helmoltz. Através de seu modelo, eles preveem a geração de vórtices e a inclinação da direção da chama, como resultado da velocidade tangencial do ar que atravessa a chama.

Wang et al. (27), quando estudaram a combustão do carvão pulverizado em um forno rotativo aplicado em cimenteiras, observaram alguns detalhes que melhor descreveram a queima na região próxima ao queimador, quanto a aspectos que garantiram, numericamente falando, resultados mais estáveis na simulação.

Como as características da zona de combustão dos fornos em cimenteiras têm bastante semelhança com as do equipamento objeto desta tese, as observações feitas por Wang et al. (27) deram maior embasamento teórico para a simulação do combustor. Pode-se destacar a utilização do modelo de turbulência RNG k-ε, devido à alta turbulência provocada pelo difusor na saída do queimador, bem como a alta temperatura do forno; em função de a forma de transferência de calor por radiação ser a dominante, o modelo utilizado foi o P-N. E próximo ao queimador, como é aconselhável nesse tipo de sistema, aplicaram-se malhas mais finas.

Mesmo sabendo que as equações de discretização de 2^ª ordem proporcionam resultados matematicamente mais precisos, optou-se por equações de 1^ª ordem na simulação, por sua melhor convergência e maior estabilidade numérica, uma vez que minimizam as oscilações de convergência.

Assim, após toda a pesquisa bibliográfica chegou-se à configuração do modelo detalhado no Quadro 2 do item 4 abaixo, que melhor descreveria as características e condições do combustor de ar e que atenderiam, plenamente, aos níveis de precisão exigidos na simulação do sistema de combustão aqui estudado.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

A parada prematura da nova unidade de processo ocorreu devido a uma falha, catastrófica, no combustor de ar. O fato de não ter resistido a mais do que poucos meses de operação indicava algum tipo de problema com o revestimento refratário; de outra forma, a temperatura externa da chapa estrutural não atingiria valores acima do projetado e o equipamento não teria sua estrutura destruída tão rapidamente.

Na inspeção visual, primeira ação tomada na análise para identificar o problema, observou-se um estado de degradação avançado do revestimento (Foto 4 e Foto 5), com necessidade de substituição de uma grande área da parede refratária.



Foto 4 – Danos ao refratário na região do combustor

Fonte: Acervo pessoal



Foto 5 – Desgaste do refratário evidenciado na câmara de combustão

Fonte: Acervo pessoal

Foi a partir daí que se iniciou a etapa de investigação para se descobrir a causa raiz do problema. Investigação que, neste item, pretende-se descrever em detalhes através da apresentação das atividades que se sucederam após a parada da unidade.

As atividades de investigação foram subdivididas da seguinte forma:

1) Análise do histórico das variáveis de processo e do modo de operação, e do histórico de alarmes da unidade que falhou.

Fizeram parte desta fase as análises por termografia (Foto 6), pelas quais comprovaram-se temperaturas na chapa próximas à temperatura de fratura do metal; ações mitigadoras vinham sendo adotadas e a unidade como um todo era monitorada para determinar outros pontos de atenção.



Foto 6 – Termografia do topo do combustor antes da falha

Fonte: Acervo pessoal

2) Inspeção interna detalhada na unidade que falhou

Fez parte dessa fase a análise do revestimento refratário em toda a câmara de combustão, conforme pode ser visto na Foto 7.



Foto 7 – Evidências do desgaste do revestimento durante inspeção interna na unidade

Fonte: Acervo pessoal

Com a inspeção, verificou-se que não havia indício de carbonização a partir do óleo combustível incorporado nas áreas adjacentes à ocorrência da falha. Logo, podese comprovar que não havia evidência de contato da chama com o revestimento. Descartou-se assim a hipótese V (chama do queimador em contato com a parede refratária) como origem da falha. 3) Análise do material refratário

Fez parte dessa fase a coleta de amostras do revestimento refratário na região da falha, conforme pode ser visto na Foto 8.

Foto 8 - Amostras do revestimento refratário coletadas na região da falha



Fonte: Acervo pessoal

Devido ao avançado estado de deterioração do refratário, ficou clara a ocorrência de fusão do material e foi possível inferir que as temperaturas de operação superaram, consideravelmente, a temperatura máxima de trabalho do revestimento, resultando na curta vida útil observada.

Nas amostras extraídas da região da falha foram encontrados trechos em que não havia presença da fase guelenita ($2CaO.Al_2O_3.SiO_2$), entretanto ainda observou-se a presença de anortita ($CaO.Al_2O_3.2SiO_2$), indicando que, nessas áreas, o revestimento refratário foi submetido a temperaturas superiores a 1200°C (1473 K) e inferiores a 1550°C (1823 K).

Com a análise do material refratário, ratificou-se que a falha não foi ocasionada por erro humano. Logo, pôde-se descartar a hipótese I (erro na aplicação do revestimento refratário). Ao mesmo tempo, puderam-se descartar as hipóteses III (Queda do revestimento refratário devido a choque térmico; e IV (Degradação do material refratário por contaminação com o combustível; como origem da falha. 4) Análise química e difração de raios X do material refratário

Fez parte dessa fase a análise de "*post-mortem*" e de refratariedade sob carga no mesmo material aplicado como revestimento refratário na região da falha, conforme pode ser visto na Foto 9.

Foto 9 – Amostras utilizadas nas análises químicas e de difração de raios X para análise "*post-mortem*" e de refratariedade sob carga



Fonte: Acervo pessoal

Durante a análise mineralógica do refratário sem uso, no qual é comum a presença majoritária das fases córundum (α -Al₂O₃) e mulita (3Al₂O₃.2SiO₂), as fases minoritárias, decorrentes da interação entre o cimento de aluminato de cálcio, e as fases de sílica da matriz refratária permitem a identificação das faixas de temperatura às quais o refratário é submetido. Entre 1200°C (1473 K) e 1400°C (1673 K), encontrase a temperatura de fusão da fase guelenita e, entre 1400°C e 1600°C, a da fase anortita.

Os resultados dos ensaios de refratariedade sob carga mostraram que o material original estava projetado para operar a no máximo 1250°C (1523 K), mesmo que a folha de dados do fornecedor indicasse temperaturas maiores. As temperaturas na região do combustor superaram esse valor.

Com a análise química do material refratário, pôde-se descartar a hipótese II (Baixa qualidade do material refratário aplicado; como origem da falha. A hipótese V (Erro na seleção do material refratário; foi verificada, mas sozinha ela não poderia ser o motivo de ocorrência da falha.

Dessa forma, atribuiu-se maior peso à hipótese VI (Problema com a fluidodinâmica do equipamento. como mecanismo de falha do combustor. Isso

explicaria a concentração dos gases de combustão, extremamente quentes, direcionados para uma específica região do revestimento refratário, conforme a Foto 10.



Foto 10 – Detalhe da região afetada pelo calor decorrente dos gases de combustão

Fonte: Acervo pessoal

A comprovação de exposição do revestimento refratário, de uma forma não uniforme, a elevadas temperaturas, motivou e direcionou as investigações para a necessidade de simular o sistema de combustão para entender o seu comportamento, levando em consideração a interação das diversas variáveis que o compõem. Mas existia o questionamento de como fazer para comprovar a hipótese de um problema fluidodinâmico em um ambiente de espaço confinado onde a temperatura média é superior a 1000^oC (1273 K). Foi quando a utilização do CFD surgiu como a ferramenta mais adequada para atender às exigências da empresa que buscava descobrir a causa raiz do problema e implementar a melhor estratégia para solucioná-lo.

Entretanto, o sistema de combustão do combustor de ar tem todas as condições que representam um extremo de incerteza, ou seja, trata-se de um sistema turbulento com fluidos multifásicos e de composição complexa, além de reações químicas múltiplas. Logo, para que as previsões para o combustor obtivessem elevada probabilidade inerente de exatidão, as seguintes condições favoráveis para a confiabilidade deveriam ser atendidas:

- A simulação deve basear-se em formulações suficientemente precisas da geometria, das condições iniciais e de contorno;
- Devem-se utilizar malhas suficientemente finas, principalmente na região de maior turbulência que é a próxima ao queimador;
- É necessário convergir assim como fazem os desequilíbrios remanescentes nas equações suficientemente pequenas;
- Basear-se em modelos físicos apropriados envolvendo apenas fenômenos nos quais as leis físicas são bem descritas pelas fórmulas incorporadas no software.

Como em todo sistema de combustão, a turbulência se faz presente. Logo, a questão a ser decidida é: **qual o modelo de turbulência deve ser usado?** Sabe-se que as modelagens com turbulência são as mais difíceis e menos precisas. A escolha do modelo de turbulência é a chave para obter bons resultados nas simulações, uma vez que os maiores erros associados a simulações em CFD são conferidos ao modelo de turbulência a ser utilizado (Engineering Simulation and Scientific Software) (6).

Contudo, a ciência não avançou o suficiente ao ponto de ter respostas definitivas para questões desse tipo. A incerteza sobre qual modelo é melhor para determinadas circunstâncias aumenta quando qualquer um dos seguintes fenômenos se faz presente:

- Efeitos do baixo número de Reynolds;
- Forças do corpo (por exemplo, flutuabilidade ou forte redemoinho, "swirl");
- Cinética de aquecimento e os efeitos de compressibilidade;
- Reação química;
- Superfícies livres (por exemplo, entre ar e água);
- Fenômenos multifase, que envolvem a mistura de gotículas, bolhas e partículas sólidas.

No sistema de combustão aqui analisado, estão presentes vários dos efeitos acima citados, o que aumenta o grau de incerteza da simulação e corrobora a importância da escolha do modelo de turbulência, que deve ser adotado. Como nos softwares de CFD existem vários modelos, sempre o mais indicado é buscar na literatura qual melhor se aplica a cada caso. Porém, sempre tendo o cuidado e a consciência de que normalmente os dados encontrados na literatura não se encaixam exatamente às circunstâncias em que o usuário está interessado, pois, se o fizessem, ele não estaria buscando fazer previsões computacionais.

A incerteza sobre a confiabilidade das previsões feitas pelo CFX, na medida em que derivam de dúvidas sobre os modelos físicos utilizados, pode ser minimizada fazendo-se comparações com dados experimentais confiáveis. No caso estudado neste trabalho, tem-se a vantagem de poder comparar os resultados obtidos na simulação com os dados reais de operação.

4 PROCEDIMENTO METODOLÓGICO

Desde o início do trabalho, a opção de aumentar a espessura do refratário em toda a zona de combustão para possibilitar trabalhar com temperaturas mais elevadas, apesar de parecer uma solução simples e óbvia do problema, não pode ser considerada.

O aumento da parede refratária acarretaria um maior peso dos equipamentos, e as fundações do prédio e as estruturas metálicas não tinham sido dimensionadas para suportar tal carga extra. Além disso, iria reduzir o diâmetro interno, acarretando uma maior velocidade dos gases e das partículas no interior dos equipamentos, tendo como consequência um aumento na erosão do revestimento.

Ao mesmo tempo, sabendo que no combustor de ar estão presentes: (i) elevadas temperaturas de processo e regiões com severos gradientes; (ii) velocidades próximas à sônica na saída do combustível do queimador; (iii) escoamentos turbulentos de difícil aferição; e (iv) escassez de informações, decidiu-se por aplicar a técnica de dinâmica dos fluidos computacional (CFD) para obter dados, por meio de simulação.

Uma vez definida a ferramenta de análise que seria utilizada no trabalho, a etapa seguinte foi estruturar uma sequência de ações para que o problema fosse resolvido em definitivo. As ações podem ser resumidas nos seguintes passos:

Passo 1. Realizar a modelagem do combustor sob as condições normais de produção, com o intuito de verificar se o modelo proposto poderia replicar o comportamento das elevadíssimas temperaturas próximas à parede do equipamento, necessárias para danificar o refratário e o equipamento.

Passo 2. Realizar estudo de convergência de malha, para identificar quantos elementos se fazem necessários para capturar os fenômenos que estão ocorrendo no limite de controle do modelo, em especial na camada limite próxima à parede do combustor.

Passo 3. Usar o modelo para determinar quais mudanças poderiam ser feitas à geometria e às dimensões do combustor para eliminar o problema.

Neste capítulo, serão apresentados os detalhes que compõem o sistema de combustão do combustor de ar e as diferentes fases de execução das simulações e modelagens realizadas por meio do aplicativo CFX da Ansys.

Na Tabela 2, são demonstradas as condições operacionais de projeto adotadas nas simulações. Apesar de a área de interesse ser reduzida em relação às dimensões do equipamento, nas simulações foram utilizados comprimentos mais alongados para os dutos de entrada e saída do combustor, conforme informado na Tabela 3, para se evitar os efeitos de recirculação.

Tabela 2 – Condições normais de projeto utilizadas nas modelagens		
	Condições operacionais	
Parâmetros	Produção	
	Normal	
Fluxo do ar (Kg/s)	32	
Temperatura do ar (K)	823	
Fluxo de óleo (Kg/s)	0,4	
Fluxo de ar primário (Kg/s)	0,85	
Pressão estática do combustor (Pa)	7800	

Fonte: Memorial descritivo do projeto

Na Tabela 3, encontram-se discriminados os parâmetros da geometria do combustor utilizados na modelagem.

Tabela 3 – Parâmetros de projeto do combustor		
Parâmotros	Dimensões	
	do combustor	
Diâmetro do combustor (m)	2,4	
Comprimento do combustor (m)	20	
Diâmetro duto de entrada do combustor (m)	2	
Comprimento duto de entrada do combustor (m)	15	
Temperatura do Ar na entrada do Combustor (K)	823	
Eante: Memorial descritivo do projeto		

Fonte: Memorial descritivo do projeto

Com base na revisão bibliográfica, adotaram-se as configurações apresentadas no Quadro 2 como o padrão para todas as modelagens:

Quadro 2 – Cornigurações t	itilizadas como setup dos modelos
Modelo de turbulência	RSM (Reynolds Stress Model)
Tipo de malha	Hexaédrica, tetraédrica & prismática
Reação de combustão	EDC models (Eddy Dissipation Concept)
Modelo de transferência de calor por radiação	P-1

Quadro 2 – Configurações utilizadas como setup dos modelos

Fonte: Setup do software CFX

Na seleção do tipo de malha adotado na modelagem, constatou-se que as malhas estruturadas com elementos hexaédricos (6 faces) demandam um maior tempo de geração de malha e teoricamente apresentam melhor convergência, ou seja, com elas obtém-se resposta em um tempo reduzido e com boa qualidade.

Entretanto, o que impediu que se trabalhasse com a malha estruturada em todos os modelos foi o fato de que as malhas não estruturadas, com os elementos tetraédricos (4 faces), são mais comuns em aplicações industriais, uma vez que esse tipo de elemento proporciona maior facilidade em capturar as curvaturas e a topologia da geometria dos equipamentos.

Outro ponto de bastante relevância é o fato de, no CFD, os fenômenos acontecerem nas camadas próximas às paredes, onde está a camada limite; por esse motivo, utilizaram-se elementos prismáticos (5 faces) nessa região, por serem elementos compridos e achatados. Os elementos prismáticos foram utilizados para capturar bem os efeitos que ocorrem na região da camada limite, onde o fluido que está em contato com a parede não tem velocidade; devido ao efeito de cisalhamento das camadas de fluido, conforme ele se afasta da parede a velocidade aumenta.

O fluido desliza por cima de si e, nesse deslizamento, as camadas de cima têm uma velocidade mais próxima da velocidade nominal de seu escoamento do que a velocidade na parede, onde o gradiente de velocidade é muito grande.

Atenção especial se deu ao parâmetro utilizado para monitorar a qualidade da malha, o *skewness*, uma vez que ele mostra o quão deformado é o elemento.

Skewness igual a zero (0) indica um elemento perfeito, e igual a um (1) indica um elemento terrível. Por isso, quanto mais alto o *skewness* (máximo 1), pior.

Caso após a discretização do componente os elementos da malha estejam muitos distorcidos, com *skewness* próximo de 1, a interpolação de um elemento para outro vai gerar resultados distorcidos e a análise vai ser comprometida. Uma modelagem com uma qualidade de malha ruim pode provocar um erro na etapa do *solver*, e logo o CFX não conseguirá realizar a interpolação dos elementos.

Pelo fato de se estar simulando um modelo industrial, adotou-se como critério de qualidade, aceitável, malhas com *skewness* de até 0,98, conforme boa prática de engenharia utilizada pelo mercado.

Os principais pontos observados nas simulações e que foram utilizados como subsídios para a classificação em termos de melhores resultados dentre as modelagens foram:

- O valor do *skewness*;
- Melhor convergência de malha;
- Análise de dependência com a malha;
- Monitoramento dos resíduos;
- Conservação de massa (entrada x saída) < 1%;
- Baixa variação na física de interesse;
- Análise de sensibilidade das principais variáveis de interesse.

4.1 MODELAGEM DO COMBUSTOR NA CONDIÇÃO NORMAL DE PROJETO

Foram adotadas na primeira modelagem ou simplesmente na simulação 1 (S1) as configurações de malha apresentadas nas Tabela 4 e Tabela 5.

Tabela 4 – Configuração da malha da simulação S1A

Defaults		
Physics Preference	CFD	
Solver Preference Fluent		
Relevance	0	
Sizi	ng	
Use Advanced Size Function	On: Curvature	
Relevance Center	Fine	
Initial Size Seed	Active Assembly	
Smoothing	High	
Transition	Slow	
Span Angle Center	Fine	
Curvature Normal Angle	Default (18,0°)	
Min Size	Default (4,3005e-003 m)	
Max Face Size	Default (0,430050 m)	
Max Size	Default (0,86010 m)	
Growth Rate	Default (1,20)	
Minimum Edge Length	9,918e-002 m	
Infla	tion	
Use Automatic Inflation	Program Controlled	
Inflation Option	Smooth Transition	
Transition Ratio 0,272		
Maximum Layers	4	
Growth Rate	1,2	
Inflation Algorithm	Pre	
View Advanced Options	No	
Assembly Meshing		
Method	None	
Patch Conforming Options		
Triangle Surface Mesher	Program Controlled	
Patch Independent Options		
Topology Checking	Yes	
Statis	tics	
Nodes	34.338	
Elements	115.367	
Mesh Metric	Skewness	
Min	2,1606E-03	
Max	0,9999	
Average	0,2311	
Standard Deviation	0,1232	
Mesh Elements	Tet4 / Wed6 / Pyr5	

Fonte – Setup do software CFX

Tabela 5 – Configuração da malha da simulação S1B

Defaults			
Physics Preference CED			
	Eluant		
	Fillent		
Relevance	0		
Sizin	g		
Use Advanced Size Function	On: Proximity		
Relevance Center	Fine		
Initial Size Seed	Active Assembly		
Smoothing	High		
Transition	Slow		
Span Angle Center	Fine		
Num Cells Across Gap	3		
Proximity Min Size	Default (4,3005e-003 m)		
Max Face Size	Default (0,430050 m)		
Max Size	Default (0,86010 m)		
Growth Rate	Default (1,20)		
Minimum Edge Length	9,918e-002 m		
Inflati	Inflation		
Use Automatic Inflation	Program Controlled		
Inflation Option	Smooth Transition		
Transition Ratio	0,272		
Maximum Layers	4		
Growth Rate	1,2		
Inflation Algorithm	Pre		
View Advanced Options	No		
Assembly N	1 eshing		
Method	None		
Patch Conforming Options			
Triangle Surface Mesher	Program Controlled		
Patch Independ	ent Options		
Topology Checking	Yes		
Statist	ics		
Nodes	48.470		
Elements	176.283		
Mesh Metric	Skewness		
Min	3,9740E-04		
Max	0,9029		
Average	0,245		
Standard Deviation	0,1274		
Mesh Elements	Tet4 / Wed6 / Pvr5		

Fonte – Setup do software CFX

Nota: O critério de não utilizar malhas com *skewness* > 0,98 acarretou a não utilização da simulação S1A. Na prática observa-se que esses valores de *skewness* proporcionam baixa qualidade às simulações.

4.2 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA DE MALHA

Partindo da simulação S1B, com configuração de malha menos refinada, discretizou-se o domínio em novas simulações e, a cada nova simulação, gerava-se uma nova malha, mais refinada que a anterior, com elementos menores (mais finos), conforme pode ser observado na Tabela 6.

Ao fim desse processo, analisaram-se as variáveis de interesse, comparando-as entre as diferentes simulações.

Simulação	S1B	S1C	S1D	S1E	S1F	S1G
Physics preference	CFD	CFD	CFD	CFD	CFD	CFD
Solver preference	Fluent	Fluent	Fluent	Fluent	Fluent	Fluent
Use advanced size function	On: proximity	On: proximity / curvature				
Smoothing	High	Medium	Low	Medium	High	High
Growth rate	(1,20)	(1,20)	(1,20)	1,15	1,15	1,1
Use automatic inflation	Program controlled	Program controlled	Program controlled	Program controlled	Program controlled	Program controlled
Inflation option	Smooth transition	Smooth transition	Smooth transition	Smooth transition	Smooth transition	Smooth transition
Growth rate	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
Nodes	48.470	65.949	66.004	101.286	101.522	214.382
Elements	176.283	239.695	240.201	402.857	404.393	954.703
Mesh metric	Skewness	Skewness	Skewness	Skewness	Skewness	Skewness
Min	3,974E-04	1,246E-03	1,486E-03	3,007E-04	5,026E-04	2,726E-04
Max	0,9029	0,9029	0,9084	0,8596	0,8887	0,8984
Average	0,245	0,2367	0,2465	0,2241	0,2247	0,2145
Standard deviation	0,1274	0,125	0,1272	0,1208	0,1214	0,117

Tabela 6 – Malhas utilizadas no estudo de convergência

4.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO UTILIZADAS NAS SIMULAÇÕES

Nos quadros de 3 a 6, a seguir, encontram-se as configurações básicas das condições de contorno utilizadas em todas as simulações, a saber:

DOMÍNIO DA MISTURA DOS GASES		
Morphology	Continuous Fluid	
Reference pressure	1 [atm]	
Domain motion	Stationary	
Turbulence	SSG Reynolds Stress	
Heat transfer model	Thermal energy	
Combustion	Eddy dissipation	
EDM coefficient B	0.5	
Maximum flame temp	1600 [°C]	
Thermal radiation	P1	
Spectral model	Gray	

Quadro 3 – Configuração básica do comburente

Fonte – Setup do software CFX

Quadro 4 – Configuração	básica do combustível
-------------------------	-----------------------

DOMÍNIO DO ÓLEO COMBUSTÍVEL		
Morphology	Particle transport fluid	
Reference pressure	1 [atm]	
Domain motion	Stationary	
Turbulence	SSG Reynolds Stress	
Heat transfer model	Particle temperature	
Combustion	Fluid Dependent	
Thermal radiation	Fluid dependent	

DOMÍNIO DA MISTURA GÁS x LÍQUIDO		
Particle coupling	Fully coupled	
Drag force	Schiller naumann	
Heat transfer	Ranz marshall	
Thermal radiation transfer	Opaque	
Emissivity	1.	

Quadro 5 - Co	nfiguração básica	da mistura	(comburente x combustível)
---------------	-------------------	------------	----------------------------

Quadro 6 – Configuração básica dos critérios de convergência

CRITÉRIOS DE CONVERGÊNCIA		
Numerics High resolution		
Turbulence	First order	
Max. interations	100	
Fluid timescale control	Physical Timescale - 0.025 [s]	
Convergence criteria	Rsm	
Residual target	1.e-4	
Dynamic model control	Global dynamic model control	

Fonte – Setup do software CFX

Os quadros de 7 a 11 apresentam as condições de contorno adotadas para o ar primário, o ar total, o combustível, os gases de combustão e a parede, respectivamente, nas simulações S1, S2, S3, S4 e S5, que foram modeladas utilizando as condições de produção de projeto.

Quadro 7 – Condição de contorno do ar primário nas condições de projeto

AR PRIMÁRIO			
Boundary type	Inlet		
Flow regime	Subsonic		
Mass and Momentum	Mass flow rate – 0.85 [Kg/s]		
Flow direction	Normal to boundary condition		
Turbulence	Medium (Intensity = 5%)		
Heat transfer	Static temperature - 403 [k]		
Thermal radiation	Local temperature		

AR TOTAL		
Boundary type	Inlet	
Flow regime	Subsonic	
Mass and momentum	Mass Flow Rate - 32 [Kg/s]	
Flow direction	Normal to boundary condition	
Turbulence	Medium (Intensity = 5%)	
Heat transfer	Static temperature - 823 [k]	
Thermal radiation Local temperature		

Quadro 8 – Condição de contorno do ar total nas condições de projeto

Fonte – Setup do software CFX

Quadro 9 - Condições de contorno do combustível nas condições de projeto

COMBUSTÍVEL			
Boundary type	Inlet		
Flow regime	Subsonic		
Mass and momentum	Mass Flow Rate – 0.4 [Kg/s]		
Flow direction	Normal to boundary condition		
Turbulence	Medium (Intensity = 5%)		
Heat transfer	Static temperature - 423 [k]		
Thermal radiation	Local temperature		

Fonte – Setup do software CFX

Quadro 10 - Condições de contorno dos gases de combustão

GASES PRODUTO DA COMBUSTÃO			
Boundary type	Outlet		
Flow regime Subsonic			
Mass and momentum	Average static pressure - 7800 [Pa]		
Pressure average Average over whole outlet			
Thermal radiation	Local temperature		

PAREDE		
Boundary type	Wall	
Mass and momentum	No slip wall	
Wall roughness	Smooth wall	
Heat transfer	Adiabatic	
Thermal radiation	Opaque	
Emissivity	1.	
Diffuse fraction	1.	

A seguir, são apresentadas nos quadros de 12 a 15 as condições de contorno utilizadas nas simulações S6, S7, S8, S9 e S10, nas quais foram modelados quatro diferentes cenários de produção.

Condições de contorno	Parâmetro
Inlet	Fluxo do ar - 21 [Kg/s]
Inlet	Fluxo de óleo – 0.3 [Kg/s]
Inlet	Fluxo de ar primário – 0.85 [Kg/s]
Outlet	Gases de combustão - 7800 [Pa]

Quadro 12 – Condições de contorno da produção 01

Fonte – Setup do software CFX

Quadre le Collaigeee	ao contenno da produção ce
Condições de contorno	Parâmetro
Inlet	Fluxo do ar - 39 [Kg/s]
Inlet	Fluxo de óleo – 0.7 [Kg/s]
Inlet	Fluxo de ar primário – 0.85 [Kg/s]
Outlet	Gases de combustão - 7800 [Pa]

Quadro 13 – Condições de contorno da produção 02

Condições de contorno	Parâmetro
Inlet	Fluxo do ar - 39 [Kg/s]
Inlet	Fluxo de óleo – 0.4 [Kg/s]
Inlet	Fluxo de ar primário – 0.85 [Kg/s]
Outlet	Gases de combustão - 7800 [Pa]

Quadro	14 –	Condicões	de	contorno	da	produc	ão	03
Quadio	1 -	Contaições	uc	contonio	uu	produç	au	00

Quadro 15 – Condiçõe	es de contorno	da produção 04
----------------------	----------------	----------------

Condições de contorno	Parâmetro	
Inlet	Fluxo do ar - 39 [Kg/s]	
Inlet	Fluxo de óleo – 0.6 [Kg/s]	
Inlet	Fluxo de ar primário – 0.85 [Kg/s]	
Outlet	Gases de combustão - 7800 [Pa]	

Fonte – Setup do software CFX

4.4 MODIFICAÇÕES SIMULADAS VISANDO A SOLUCIONAR O PROBLEMA DO COMBUSTOR

4.4.1 Modificação 01 – Redução da entrada do ar na câmara de combustão

Na Tabela 7, encontram-se as dimensões originais e modificadas do combustor que foram utilizadas nas simulações realizadas para a modificação 01.

	(c			1	
Parâmetros	Dimensões	Dimensões	Dimensões	Dimensões	Dimensões
	S1E (original)	S2A	S2B	S2C	S2D
Largura da entrada do ar no combustor (mm)	1074	1047	1031	1007	983
Comprimento do combustor (m)	20	20	20	20	20
Diâmetro duto de entrada do combustor (m)	2	2	2	2	2
Comprimento duto de entrada do combustor (m)	15	15	15	15	15
Altura do domo do combustor (m)	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3

Tabela 7 – Comparativo das dimensões simuladas na modificação 01

4.4.2 Modificação 02 – Prolongamento tangencial da entrada do ar na câmara de combustão

Na Tabela 8, encontram-se as dimensões originais e modificadas do combustor que foram utilizadas nas simulações realizadas para a modificação 02.

Barâmotros	Dimensões	Dimensões	Dimensões				
	Dimensões S1E (original)Dimensões S3ADim2,42,620202020222151515	S3B					
Diâmetro do combustor (m)	2,4	2,6	2,8				
Comprimento do combustor (m)	20	20	20				
Diâmetro duto de entrada do combustor (m)	2	2	2				
Comprimento duto de entrada do combustor							
_(m)	15	15	15				

Tabela 8 – Comparativo das dimensões simuladas na modificação 02

4.4.3 Modificação 03 – Redução do domo do combustor associada à redução do duto de entrada de ar

Na Tabela 9, encontram-se as dimensões modificadas do combustor que foram utilizadas nas simulações realizadas para a modificação 03.

Tabela 9 – Comparativo das dimensões sindiadas na modificação 03							
Parâmetros	Dimensões	Dimensões	Dimensões	Dimensões	Dimensões		
	S4A	S4B	S4C	S4D	S4E		
Largura da entrada do ar no combustor (mm)	1074	1047	1031	1007	983		
Comprimento do combustor (m)	20	20	20	20	20		
Diâmetro duto de entrada do combustor (m)	2	2	2	2	2		
Comprimento duto de entrada do combustor (m)	15	15	15	15	15		
Altura do domo do combustor (m)	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3		

Tabela 9 – Comparativo das dimensões simuladas na modificação 03

Fonte – Setup do software CFX

4.4.4 Modificação 04 – Prolongamento tangencial da entrada do ar na câmara de combustão associada à redução do domo do combustor

Na Tabela 10, encontram-se as dimensões modificadas do combustor que foram utilizadas nas simulações realizadas para a modificação 04.

Parâmetros	Dimensões S5A	Dimensões S5B			
Largura da entrada do ar no combustor (mm)	1074	1074			
Diâmetro do combustor (m)	2,6	2,8			
Comprimento do combustor (m)	20	20			
Diâmetro duto de entrada do combustor (m)	2	2			
Comprimento duto de entrada do combustor (m)	15	15			
Altura do domo do combustor (m)	0,3	0,3			
Eonte - Setun do software CEX					

Tabela 10 – Comparativo das dimensões simuladas na modificação 04

4.5 SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS COM DIFERENTES CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO

A partir da definição da malha a ser adotada e para cada uma das situações propostas para a correção do problema, foram simulados cenários de produção para validação do modelo. O intuito era determinar se os resultados alcançados se apresentavam em todas as condições existentes. Além disso, as simulações em diferentes cenários tinham como objetivo determinar a sensibilidade do combustor para diferentes condições.

Essa etapa serviu também para distinguir a diferença entre verificação do modelo, que nada mais é do que comprovar que as equações foram resolvidas corretamente, e validação do modelo, que é comprovar que foram resolvidas as equações corretas. A preocupação foi certificar-se de que a correta física estava sendo utilizada para o problema em questão e que ela estava sendo apropriadamente simulada. Nas modelagens, foram adotados os critérios apresentados na Tabela 11.

Produção (tph)	Fluxo do ar total (Kg/s)	Temperatura do ar (K)	Fluxo de combustível (Kg/s)				
Produção 01	21	923	0,3				
Produção 02	39	833	0,7				
Produção 03	39	973	0,4				
Produção 04	39	933	0,6				
	– – – – – – – – – – – – – – – – – – –						

Tabela 11 – Cenários de produção simulados

Fonte – Setup do software CFX

Os resultados de todas as simulações realizadas encontram-se pormenorizados no item 5 a seguir.

RESULTADOS E DISCUSSÃO 5

MODELAGEM DO COMBUSTOR NA CONDIÇÃO NORMAL DE PROJETO 5.1

Com base nas condições apresentadas no item 0, foi realizada a primeira simulação com a configuração de malha menos refinada, simulação S1B. Na Figura 11 encontra-se a geometria modelada e a indicação das condições de contorno utilizadas.



Figura 11 – Geometria e condições de contorno adotadas nas simulações S1B

Fonte – Software CFX

Já na Figura 12 tem-se um detalhe da malha gerada, no qual nota-se a presença de elementos bem grandes, caracterizando o seu baixo refinamento. Mas, apesar disso, os resultados obtidos com a simulação S1B já indicaram, no plano de corte onde ocorreu a falha no combustor, um perfil de temperatura com uma maior concentração na região próxima à parede, como mostra a área de cor mais avermelhada na Figura 13. Porém, se faz necessário um refinamento da malha, apresentado na Tabela 12, para que os efeitos na camada limite sejam mais bem discretizados.



Fonte – Gerador de malha do software CFX



Figura 13 – Perfil de temperatura na câmara de combustão - Simulação S1B



Tabela 12 – Dealnes da maina da simulação 516					
Simulação	S1B				
Physics preference	CFD				
Solver preference	Fluent				
Use advanced size function	On: proximity				
Smoothing	High				
Growth rate	Default (1,20)				
Use automatic inflation	Program controlled				
Inflation option	Smooth transition				
Growth rate	1,2				
Nodes	48.470				
Elements	176.283				
Mesh metric	Skewness				
Min	3,9740E-04				
Max	0,9029				
Average	0,245				
Standard deviation	0,1274				

Tabela 12 – Dealhes da malha da simulação S1B

Fonte – Setup do software CFX

5.2 ESTUDO DE CONVERGÊNCIA DE MALHA

O refinamento da malha, detalhado na Tabela 13, foi realizado até o ponto em que a variação no resultado da variável de interesse, no caso a temperatura máxima na parede do combustor, tornou-se desprezível, conforme observado no Gráfico 1. Caracterizou-se com isso que os resultados não dependiam mais da malha adotada e, logo, a física real estava sendo capturada nas simulações.

rabela 13 – Estatística das mainas utilizadas no estudo de convergencia								
Estatística	S1B	S1C	S1D	S1E	S1F	S1G		
Nós	48470	65949	66004	101286	101522	214382		
Elementos	176283	239695	240201	402857	404393	954703		
Skewness Max	0,90	0,90	0,91	0,86	0,89	0,90		

Tabela 13 – Estatística das malhas utilizadas no estudo de convergência



Fonte - Resultados do software CFX

O valor da temperatura máxima na parede do combustor foi obtido através da inserção de uma superfície cilíndrica ao longo de todo o perímetro do equipamento, na região onde ocorreu a falha, conforme pode ser visto na Figura 14. Feito isso, foi possível determinar a temperatura por meio da expressão *Maxval(temperature)* @surface revolution 1, no CFX Post.



Figura 14 - Exemplo da superfície inserida para identificar a temperatura na região da falha

Fonte – Resultados do software CFX

Na geração de malha, utilizou-se como opção de *Inflation* a *Smooth transition,* uma vez que essa função atribui à malha elementos prismáticos que se adaptam bem ao resto da malha, substituindo com isso a necessidade de se definir qual o tamanho da camada de prisma a ser adotada para que os efeitos da camada limite sejam capturados.

Já em termos de *Solver preference*, optou-se por utilizar o *Fluent*, pelo fato de ele exigir prismas menores na opção *Smooth transition*, então ele foi priorizado na geração de malha. O CFX não foi adotado por permitir camadas maiores de prisma.

Por meio do estudo de convergência de malha, decidiu-se trabalhar com a simulação S1E, destacada no Gráfico 1, como sendo a simulação de referência que representaria as configurações originais do combustor, uma vez que os seus resultados não diferiam daquelas com maior número de nós e, dentre as simulações, foi a que apresentou o menor *skewness*, 0,86.

Outra vantagem da S1E é o fato de demandar menor tempo para convergir em comparação com as simulações com maior número de nós, já que, quanto mais refinada a malha, maior capacidade computacional é exigida.

Na Figura 15, observa-se um corte do combustor mostrando em detalhe a malha gerada na simulação S1E. Já a Figura 16 traz lado a lado os cortes realizados nas simulações S1B e S1E, a fim de poder evidenciar o refinamento que ocorreu na malha; observam-se elementos de maior tamanho na malha gerada na simulação S1B, demostrando com isso seu menor refinamento, ou seja, sua maior imprecisão.



Figura 15 – Representação da malha da simulação S1E

Fonte – Gerador de malha do software CFX



Figura 16 – Comparação entre as malhas das simulações S1B e S1E

Fonte – Gerador de malha do software CFX

O perfil da temperatura do combustor de ar, obtido por meio da simulação S1E, é apresentado na Figura 17. Devido à utilização de uma malha mais refinada, pode-se observar uma melhor representação da região de maior concentração de calor próxima à parede, na mesma região onde ocorreu a falha no equipamento.



Figura 17 – Perfil de temperatura na câmara de combustão - Simulação S1E

Fonte – Resultados do software CFX

Fica ainda mais fácil observar o comportamento da variável de interesse, a temperatura, na câmara de combustão; quando comparam-se os resultados das simulações S1B (malha menos refinada) e S1E (malha mais refinada), percebe-se uma maior concentração da região de maior temperatura. É possível ver a comparação entre as áreas avermelhadas destacadas na Figura 18.





Nota-se pela Figura 19 que a malha mais refinada conseguiu indicar com certa precisão a região onde ocorreu a falha, pela exposição do revestimento refratário a elevadas temperaturas.



Figura 19 – Região da falha simulada (S1E) versus Região da falha real

Fonte - Resultados do software CFX e acervo pessoal

Uma vez que a simulação S1E conseguiu retratar com aceitável acurácia o comportamento do combustor de ar, nas condições normais de operação, partiu-se para a validação do modelo e a análise da sensibilidade do combustor através da simulação de diferentes cenários de produção, conforme a Tabela 11.

Os resultados obtidos nas simulações do combustor, tendo como referência as configurações da simulação S1E em diferentes cenários de produção, podem ser observados na Tabela 14 e no Gráfico 2.

Tabela 14 – Resultados simulação S1E em diferentes produções – Simulação S6							
Resultados	S1E	S6A	S6B	S6C	S6D		
Temperatura máxima na região da falha (K)	1315	1608	1466	1216	1344		

Fonte – Resultados do software CFX



Fonte – Resultados do software CFX

Abaixo, encontram-se os resultados apresentados na forma de imagens extraídas do módulo de pós-processamento do CFX, para melhor visualização do comportamento da distribuição da temperatura no interior do combustor. A Figura 20 representa a simulação do combustor em sua configuração original e na condição de produção normal de projeto, conforme a Tabela 2.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 21 representa a simulação do combustor em sua configuração original e na condição de produção 01 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 22 representa a simulação do combustor em sua configuração original e na condição de produção 02 da Tabela 11.



Figura 22 – S1E nas condições de produção 02 – Simulação S6B
A Figura 23 representa a simulação do combustor em sua configuração original e na condição de produção 03 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 24 representa a simulação do combustor em sua configuração original e na condição de produção 04 da Tabela 11.



Fonte - Resultados do software CFX

As simulações destacaram que operar o combustor na condição de produção 03, ou seja, com uma maior temperatura do ar e menor fluxo de combustível, reduz significativamente a zona afetada pelo calor. Porém, não a elimina.

Por outro lado, operar constantemente nessas condições não era possível uma vez que, para se chegar nelas, costumava-se trabalhar com excesso de ar reduzido, ou seja, a relação ar/combustível teria que trabalhar em limites muito próximos do ponto de desligamento da unidade, por atuação da malha de controle do sistema de combustão. Por motivos de segurança, priorizava-se operar com as mais altas razões de excesso de ar.

5.3 MODIFICAÇÕES SIMULADAS VISANDO SOLUCIONAR O PROBLEMA DO COMBUSTOR

5.3.1 Modificação 01 – Redução da entrada do ar na câmara de combustão

Nessa etapa, foram simuladas quatro (04) opções de redução do duto de entrada do ar na câmara de combustão, conforme pode ser visto na Tabela 15 e na Figura 25.

Tabela 15 – Dimensões simuladas na modificação UT									
Parâmetros	S1E	S2A	S2B	S2C	S2D				
Duto entrada (mm)	1074	1047	1031	1007	983				

- . . 1. ... 4 5 ~ 4

Fonte – Setup do software CFX



Figura 25 – Geometrias simuladas na modificação 01

Fonte – Design modeling do software CFX

Esperava-se, com a redução na entrada do combustor, obter um incremento na velocidade do ar de forma a criar uma condição para o fluxo que proporcionasse um vórtex mais estável, forçando-o para baixo e com isso centralizando a chama. Com isso, a zona de calor seria deslocada e a concentração de gases quentes na região do topo e nas paredes do combustor seria atenuada.

Os resultados apresentados na Tabela 16 indicam que a simulação S2B foi a que apresentou a menor temperatura na região onde ocorreu a falha. O Gráfico 3 deixa ainda mais clara a variação da temperatura provocada pela redução do duto de entrada do ar. E o fato de a simulação S2B, mesmo não tendo a maior velocidade, conforme demostrado nos gráficos 4 e 5, ter sido o melhor resultado, levou à constatação da existência de um limite para redução nas dimensões propostas.

Tabela 16 – Resultados das simulações da modificação 01						
Resultados	S1E	S2A	S2B	S2C	S2D	
Temperatura máxima na região da falha (K)	1315	1319	1238	1295	1362	
Velocidade máxima lado da redução (m/s)	55,2	56,1	53,7	52,2	48,7	
Velocidade máxima lado oposto a redução (m/s)	39,2	39,5	40,2	40,1	41,5	
Eanto Docultados do softu		V				

Tabala 10 des simulas ãos de madificas ão Od

Fonte – Resultados do software CFX

Gráfico 3 - Temperaturas máximas na região da falha - Modificação 01



Fonte – Resultados do software CFX

Analisando os gráficos de velocidade, observa-se o efeito do estrangulamento feito na entrada do ar por meio do avanço de um dos lados do duto. Criou-se uma espécie de barreira em que, no lado da redução, o fluxo encontrava maior resistência para se deslocar; consequentemente houve a redução na velocidade nessa região (Gráfico 4). Entretanto, para que o balanço volumétrico da unidade se mantivesse constante, houve um incremento da velocidade na região oposta à redução (Gráfico 5), e esse efeito acarretou as mudanças observadas nas simulações S2.



Fonte – Resultados do software CFX



Gráfico 5 - Velocidade máxima no lado oposto a redução - Modificação 01

Fonte - Resultados do software CFX

Constatou-se que reduções maiores que 5%, como no caso das simulações S2C e S2D, acarretam efeitos contrários ao que se deseja, ou seja, a temperatura no combustor, ao invés de diminuir, aumenta, uma vez que não se obtém a centralização da chama por meio de um vórtex mais estável. Um dos motivos para esse efeito é o aparecimento de um fluxo de recirculação, conforme demostrado no destaque da Figura 26.



Fonte – Resultados do software CFX

São demostrados por meio das Figuras 27 e 28 os resultados alcançados com a redução do duto de entrada do ar no combustor de 1074 mm (S1E) para 1031 mm (S2B).



Fonte – Resultados do software CFX



Figura 28 - Comportamento dos fluidos no combustor - Simulação S2B

Fonte – Resultados do software CFX

Em termos de processo, o que ocorreu na simulação S2B foi o aumento da velocidade do ar no lado oposto à redução do duto de entrada, que proporcionou uma entrada tangencial no equipamento muito forte e consequentemente um fluxo de centrifugação também mais forte, resultando no deslocamento do núcleo da queima de combustível para mais próximo da região central do combustor, afastando-se com isso da região da parede (Figura 29).

Comparando os resultados da simulação S1E, que é a simulação de referência, com a S2B, que foi a que apresentou o melhor resultado dentre as da modificação 01, fica evidente o deslocamento da zona de calor, que antes concentrava-se próxima à parede, para uma região mais central, próxima ao queimador. Minimizou-se com isso a concentração de gases quentes na região das paredes do equipamento, como se pode observar nas áreas destacadas na Figura 30.



Fonte – Resultados do software CFX



Figura 30 – Comparativo dos perfis de temperatura – Simulações S1E e S2B

Fonte – Resultados do software CFX

Como a simulação S2B foi a que melhor resultado apresentou dentre as opções simuladas na proposta de modificação 01, decidiu-se utilizá-la para identificar como seria o comportamento do combustor de ar caso a modificação 01 fosse implementada e a unidade tivesse que operar em diferentes cenários de produção, conforme a Tabela 11.

Os resultados obtidos nas simulações, tendo como referência as configurações da simulação S2B em diferentes cenários de produção, podem ser observados na Tabela 17 e no Gráfico 6.

Tabela 17 – Resultados simulação S2B em diferentes produções – Simulação S7							
Resultados	S1E	S2B	S7A	S7B	S7C	S7D	
Temperatura máxima na região da falha (K)	1505	1463	1157	1379			
Fonte – Resultados do software CFX							



Fonte – Resultados do software CFX

Abaixo, encontram-se os resultados apresentados na forma de imagens extraídas do módulo de pós-processamento do CFX, para melhor visualização do comportamento da distribuição da temperatura no interior do combustor.

A Figura 31 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S2B, e na condição de produção 01 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 32 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S2B, e na condição de produção 02 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 33 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S2B, e na condição de produção 03 da Tabela 11.



Figura 33 – S2B nas condições de produção 03 – Simulação S7C



A Figura 34 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S2B, e na condição de produção 04 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

As simulações demostraram que o efeito positivo que a redução no duto de entrada do ar proporcionou, quando simulada na condição de operação normal de projeto, não é observado quando o combustor é exposto aos diferentes cenários de produção.

A aplicação da proposta de modificação 01 é perfeitamente viável. Entretanto, fica condicionada a limitações no modo de operação da unidade, ou seja, deve-se evitar operar nas condições de retorno de produção após o desligamento da unidade, quando tem-se baixo fluxo de ar total combinado com moderado fluxo de óleo para o combustor, conforme a condição de produção 01 (S7A), e baixas temperaturas do ar e elevados fluxos de combustível conforme a produção 02, observada na simulação S7B.

5.3.2 Modificação 02 – Prolongamento tangencial da entrada do ar na câmara de combustão

Nessa etapa, foram simuladas duas (02) opções de prolongamento tangencial do duto de entrada do ar na câmara de combustão, conforme pode ser visto na Tabela 18 e na Figura 35.

Tabela 18 – Dimensoes simuladas na modificação 02					
Parâmetros	S1E (original)	S3A	S3B		
Diâmetro do combustor (m)	2,4	2,6	2,8		
E .					



Fonte – Setup do software CFX

Figura 35 – Geometrias simuladas na modificação 02

Fonte – Design Modeling do software CFX

Com a modificação 02, pretendia-se manter o núcleo da queima de combustível ao longo do eixo central do combustor através do deslocamento tangencial da entrada na parte superior do equipamento.

Os resultados apresentados na Tabela 19 indicam que a simulação S3B foi a que apresentou o maior incremento de velocidade e, consequentemente, a menor temperatura na região onde ocorreu a falha.

Tabela 19 – Resultados das simulações da modificação 02							
Resultados	S1E	S3A	S3B				
Temperatura máxima na região da falha (K)	1753	1275	1157				
Velocidade máxima do ar entrada combustor (m/s)	55,2	58,2	58,5				
Eanta Bacultadas da softwara CEX							

Tabela 19 – Resultados das simulaç	ções da	modificação 02
------------------------------------	---------	----------------

Fonte – Resultados do software CFX

Os resultados das simulações da modificação 02 apresentados na forma dos gráficos 7 e 8 deixam evidentes os efeitos positivos da entrada tangencial no combustor, e o aumento da velocidade e a consequente redução da temperatura na região da falha.



Fonte – Resultados do software CFX



Fonte – Resultados do software CFX

São demostrados por meio das Figuras 36 e 37 os resultados alcançados com o prolongamento do duto de entrada do combustor de 2400 mm (S1E) para 2800 mm (S3B).



Figura 36 – Perfil de temperatura na câmara de combustão - Simulação S3B

Fonte – Resultados do software CFX



Fonte - Resultados do software CFX

Fica evidente na Figura 38 o deslocamento da zona de calor, que antes concentrava-se próxima à parede, como pode ser visto na simulação S1E. Com o prolongamento do duto de entrada, ela deslocou-se para uma região mais central, próxima ao queimador, como demostra a simulação S3B, praticamente eliminando a concentração de gases quentes na região das paredes do equipamento.



Fonte – Resultados do software CFX

Com essa alteração na geometria do combustor, a chama demonstrou-se mais centralizada, e as temperaturas da parede refratária atingiram valores abaixo dos 885⁰C (1157 K).

Um dos pontos negativos da modificação 02 são os impactos das interferências nos equipamentos vizinhos, que precisam ser bem avaliadas, uma vez que podem fazer dessa uma opção de alto custo e elevado tempo de indisponibilidade da unidade. Outro ponto negativo continua sendo o aumento da velocidade do ar nessa região, que teve um incremento na ordem de 6% em relação aos valores de projeto, aumentando a probabilidade de desgaste do revestimento refratário por meio de erosão.

Como a simulação S3B foi a que melhor resultado apresentou dentre as opções simuladas na proposta de modificação 02, decidiu-se utilizá-la para identificar como seria o comportamento do combustor de ar caso a modificação 02 fosse implementada e a unidade tivesse que operar em diferentes cenários de produção, conforme a Tabela 11.

Os resultados obtidos nas simulações, tendo como referência as configurações da simulação S3B em diferentes cenários de produção, podem ser observados na Tabela 20 e no Gráfico 9.

Tabela 20 – Resultados simulação 336 em diferentes produções – Simulação 36							
Resultados	S1E	S3B	S8A	S8B	S8C	S8D	
Temperatura máxima na região da falha (K) 1315 1157 1318 1295 1091 11						1166	
Fonte – Resultados do software CFX							

aulasão COD sus diferentes





Fonte – Resultados do software CFX

Abaixo, encontram-se os resultados apresentados na forma de imagens extraídas do módulo de pós-processamento do CFX, para melhor visualização do comportamento da distribuição da temperatura no interior do combustor.

A Figura 39 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S3B, e na condição de produção 01 da Tabela 11.

Charles a co



Fonte - Resultados do software CFX

A Figura 40 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S3B, e na condição de produção 02 da Tabela 11.



Figura 40 – S3B nas condições de produção 02 – Simulação S8B

A Figura 41 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S3B, e na condição de produção 03 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 42 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S3B, e na condição de produção 04 da Tabela 11.



Gustavo Gomes Sampaio Cursino

Tese de Doutorado

As simulações demostraram que o efeito positivo que o prolongamento no duto de entrada do ar proporcionou, quando simulado na condição de operação normal de projeto, também é percebido quando o combustor é exposto aos diferentes cenários de produção, e observou-se uma redução significativa da temperatura próxima à parede do equipamento.

Mesmo nas piores condições de operação, que são a retomada da produção e aquela na qual opera-se com baixas temperaturas do ar e elevados fluxos de combustível, conforme observado nas simulações S8A e S8B, respectivamente, as temperaturas na região próxima à parede do equipamento atingiram valores máximos na ordem de 1050^oC (1320 K).

Logo, a aplicação da proposta de modificação 02 atende a todas as condições de operação. E, diferentemente da proposta da modificação 01, a sua aplicação não incorre em nenhuma limitação no modo de operação da unidade.

5.3.3 Modificação 03 – Redução do domo do combustor associada à redução do duto de entrada de ar

Nessa etapa, foram simuladas cinco (05) opções de redução do domo do combustor associadas à redução do duto de entrada do ar na câmara de combustão, conforme pode ser visto na Tabela 21 e na Figura 43.

Parâmotros	Dimensão	Dimensão	Dimensão	Dimensão	Dimensão
Parametros	S4A	S4B	S4C	S4D	S4E
Largura da entrada do ar no combustor (mm)	1074	1047	1031	1007	983
Altura do domo do combustor (m)	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3

Tabela 21 – Dimensões simuladas na modificação 03

Fonte – Setup do software CFX



Figura 43 – Geometrias simuladas na modificação 03



Esperava-se com essa modificação unir os benefícios da redução da entrada de ar, já avaliados na simulação S2 descrita no item 5.3.1, com a eliminação do ponto historicamente mais crítico em termos de concentração de temperatura no combustor, que é a região do topo do equipamento.

Os resultados apresentados na Tabela 22 indicam que a simulação S4E foi a que apresentou a maior velocidade, dentre as simulações S4, e consequentemente a menor temperatura na região onde ocorreu a falha.

l abela 22 – Resultados das simulações da modificação 03								
Resultados	S1E	S4A	S4B	S4C	S4D	S4E		
Temperatura máxima na região da falha								
_(K)	1315	1351	1388	1326	1324	1272		
Velocidade máxima do ar entrada								
_combustor (m/s)	55,2	52,0	49,0	52,9	49,4	53,2		
Fonto Dogultados do softwara CEV								

Fonte - Resultados do software CFX

Os resultados das simulações da modificação 03 apresentados na forma dos gráficos 10 e 11 deixam ainda mais clara a relação entre a velocidade dos gases no combustor e a redução da temperatura, quando se reduz a região do domo do combustor.



Fonte – Resultados do software CFX



Fonte – Resultados do software CFX

Analisando os resultados das simulações da modificação 03, pode-se constatar um fato novo: a redução do domo provocou um comportamento diferente da velocidade à medida que o duto de entrada foi reduzido. Nesse caso, mesmo quanto se reduzia o duto de entrada, as velocidades, ao invés de aumentar em relação à geometria original, diminuíram. E com isso, quanto menor era o incremento na velocidade do ar, maiores eram as temperaturas na região da parede do equipamento onde ocorreu a falha.

Entretanto, esse não foi o comportamento observado para a simulação S4E que, mesmo tendo menor velocidade e maior proximidade da região da falha com o queimador, ainda apresentou temperaturas máximas menores que as observadas na geometria original. A maior aproximação com o queimador justifica o incremento da temperatura na região da falha nas demais simulações S4, uma vez que a região do topo do equipamento fora reduzida e essa é, historicamente, a região de maior concentração de calor no combustor.

Pode-se observar na Figura 44 a diferença entre a geometria com o domo original e com o domo reduzido, ambos simulados com a maior redução do duto de entrada (983 mm). Quando simulada essa redução na geometria com o domo original (S2D), observou-se a presença de um fluxo de recirculação logo após a redução; o mesmo efeito não foi observado quando o domo foi reduzido (S4E).



Figura 44 – Efeito da redução do domo na distribuição de velocidade do ar na entrada do combustor

Fonte – Resultados do software CFX

São demostrados por meio das figuras 45 e 46 os resultados alcançados com a redução do duto de entrada do ar no combustor, de 1074 mm (S1E) para 983 mm (S4E), associados à redução do domo. Observa-se que a redução do domo minimiza o efeito da fluidodinâmica dos gases sob o fluxo de combustível, que provocava o deslocamento do fluxo para próximo da região da parede, acarretando a concentração da queima do combustível nessa região.



Fonte – Resultados do software CFX



Figura 46 - Comportamento dos fluídos no combustor - Simulação S4E

Fonte – Resultados do software CFX

A área em vermelho, na figura, mostra claramente que as maiores temperaturas encontram-se bem mais centralizadas.

Fica evidente na Figura 47 o deslocamento da zona de calor, que antes concentrava-se próxima à parede, como pode ser visto na simulação S1E; com a proposta da modificação 03, ela deslocou-se para uma região mais central, próxima ao queimador, como demostra a simulação S4E. Minimizou-se com isso a concentração de gases quentes na região das paredes do equipamento.



Fonte - Resultados do software CFX

Com essas alterações na geometria do combustor, a chama demostrou-se mais centralizada e as temperaturas da parede refratária atingiram valores abaixo dos 1000⁰C (1272 K).

Um dos pontos negativos da modificação 03 são os impactos das interferências nos equipamentos e nas estruturas metálicas vizinhas, uma vez que no projeto da unidade a estrutura do domo do combustor também serve como estrutura de suportação dos equipamentos vizinhos. Logo, essa alteração precisa ser bem avaliada, uma vez que pode fazer dessa uma opção de alto custo e elevado tempo de indisponibilidade da unidade.

No entanto, um ponto bastante positivo foi a redução da velocidade do ar nessa região, que teve um decréscimo na ordem de 3,6% em relação aos valores de projeto, podendo vir a impactar, positivamente, nos resultados de granulometria do produto, um

dos mais importantes critérios de qualidade da unidade, possibilitando com isso o aumento da produção.

Como a simulação S4E foi a que melhor resultado apresentou dentre as opções simuladas na proposta de modificação 03, decidiu-se utilizá-la para identificar como seria o comportamento do combustor de ar caso a modificação 03 fosse implementada e a unidade tivesse que operar em diferentes cenários de produção, conforme a Tabela 11.

Os resultados obtidos nas simulações, tendo como referência as configurações da simulação S4E em diferentes cenários de produção, podem ser observados na Tabela 23 e no Gráfico 12.

Tabela 23 – Resultados simulação S4E em diferentes produções – Simulação S9

Resultados	S1E	S4E	S9A	S9B	S9C	S9D
Temperatura máxima na região da falha (K)	1315	1272	1347	1525	1281	1414
Eonte – Besultados do software CEX						



Fonte – Resultados do software CFX

Abaixo, encontram-se os resultados apresentados na forma de imagens extraídas do módulo de pós-processamento do CFX, para melhor visualização do comportamento da distribuição da temperatura no interior do combustor.

A Figura 48 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S4E, e na condição de produção 01 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 49 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S4E, e na condição de produção 02 da Tabela 11.



A Figura 50 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S4E, e na condição de produção 03 da Tabela 11.



Fonte - Resultados do software CFX

A Figura 51 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S4E, e na condição de produção 04 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

As simulações demostraram o efeito positivo que a redução do domo proporciona uma vez que foi capaz de apresentar um comportamento diferente do outrora observado na simulação S2D, na qual a redução do duto de entrada do ar de 1074 mm para 983 mm não demonstrou bons resultados.

Essa mesma geometria que não havia demostrado bons resultados quando associada à redução do domo foi responsável pelo melhor comportamento do combustor, mesmo quando exposto aos diferentes cenários de produção dentre todas as simulações S4.

A aplicação da proposta de modificação 03 é viável, ainda mais pela possibilidade do aumento de produção por causa da redução da velocidade. Entretanto, fica condicionada a limitações no modo de operação da unidade, ou seja, deve-se evitar operar a elevados fluxos de combustível conforme as produções 02 e 04, observadas nas simulações S9B e S9D. Essa limitação deve-se à maior proximidade da região da falha ao queimador devido à redução do domo.

5.3.4 Modificação 04 – Prolongamento tangencial da entrada do ar na câmara de combustão associado à redução do domo do combustor

Nessa etapa, foram simuladas duas (02) opções de redução do domo do combustor associadas ao prolongamento do duto de entrada do ar na câmara de combustão, conforme pode ser visto na Tabela 24 e na Figura 52.

Parâmetros	S1E (original)	S5A	S5B					
Diâmetro do combustor (m)	2,4	2,6	2,8					
Altura do domo do combustor (m)	1,3	0,3	0,3					

Tabela 24 – Dimensões simuladas na modificação 04

Fonte – Setup do software CFX

Figura 52 – Geometrias simuladas na modificação 04



Fonte – Design modeling do software CFX

Esperava-se com essa modificação unir os benefícios do prolongamento da entrada de ar, já avaliados na simulação S3 descrita no item 5.3.2 e que demostraram excelentes resultados, com a eliminação do ponto historicamente mais crítico em termos de concentração de temperatura no combustor, que é a região do topo do equipamento.

Os resultados apresentados na Tabela 25 indicam que a simulação S5B foi a que apresentou o maior incremento de velocidade e, consequentemente, a menor temperatura na região onde ocorreu a falha.

Resultados	S1E	S5A	S5B			
Temperatura na região da falha (K)	1439	1235	1211			
Velocidade média do ar no combustor (m/s)	55,2	54,8	56,7			

Tabela 25 – Resultados das	simulações da	modificação 04
----------------------------	---------------	----------------

Fonte – Resultados do software CFX

Os resultados das simulações da modificação 04 apresentados na forma dos gráficos 13 e 14 deixam ainda mais clara a relação entre o aumento da velocidade dos gases no combustor e a redução da temperatura.



Fonte – Resultados do software CFX





São demostrados por meio das figuras 53 e 54 os resultados alcançados com o prolongamento do duto de ar no combustor, de 2400 mm (S1E) para 2800 mm (S5B), associado à redução do domo.



Fonte – Resultados do software CFX



Figura 54 – Comportamento dos fluidos no combustor – Simulação S5B

Observa-se na Figura 54 que a redução do domo associada ao prolongamento da entrada de ar elimina por completo o efeito da fluidodinâmica dos gases sob o fluxo de combustível, não mais ocorrendo o deslocamento do fluxo para próximo da região da parede, acarretando centralização da queima do combustível.

Fica ainda mais evidente na Figura 55 o deslocamento da zona de calor, que antes concentrava-se próxima à parede, como pode ser visto na simulação S1E. Com a proposta da modificação 04, ela deslocou-se para uma região mais central, próxima ao queimador, como demonstra a simulação S5B, eliminando com isso a concentração de gases quentes na região das paredes do equipamento.



Fonte – Resultados do software CFX

Com essas alterações na geometria do combustor, a chama demonstrou-se inteiramente centralizada, e as temperaturas da parede refratária atingiram valores abaixo dos 905⁰C (1176 K).

Um dos pontos negativos da modificação 04 são os impactos das interferências nos equipamentos e nas estruturas metálicas vizinhas, como já fora falado. Logo, essa alteração precisa ser muito bem avaliada, uma vez que essa é a opção de mais alto custo e que vai demandar o tempo de indisponibilidade mais elevado da unidade. Outro

ponto negativo continua sendo o aumento da velocidade e seus efeitos negativos já explicados.

Como a simulação S5B foi a que melhor resultado apresentou dentre as opções simuladas na proposta de modificação 04, decidiu-se utilizá-la para identificar como seria o comportamento do combustor de ar caso a modificação 04 fosse implementada e a unidade tivesse que operar em diferentes cenários de produção, conforme a Tabela 11.

Os resultados obtidos nas simulações, tendo como referência as configurações da simulação S5B em diferentes cenários de produção, podem ser observados na Tabela 26 e no Gráfico 15.

Tabela 26 – Resultados simulação S5B em diferentes produções – Simulação S10

Resultados	S1E	S5B	S10A	S10B	S10C	S10D
Temperatura na região da falha (K)	1315	1176	1211	1360	1154	1247
Fonte - Besultados do software CEX						



Fonte – Resultados do software CFX

Fonte – Resultados do software CFX

Abaixo, encontram-se os resultados apresentados na forma de imagens extraídas do módulo de pós-processamento do CFX, para melhor visualização do comportamento da distribuição da temperatura no interior do combustor.
A Figura 56 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S5B, na condição de produção 01 da Tabela 11.



Fonte – Resultados do software CFX

A Figura 57 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S5B, na condição de produção 02 da Tabela 11.



A Figura 58 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S5B, na condição de produção 03 da Tabela 11.



Figura 58 – S5B nas condições de produção 03 – Simulação S10C

A Figura 59 representa a simulação do combustor com sua configuração modificada, conforme S5B, na condição de produção 04 da Tabela 11.



As simulações demostraram que o efeito positivo que a redução do domo associada ao prolongamento do duto de entrada do ar proporcionou, quando simulado na condição de operação normal de projeto, também é observado quando o combustor é exposto aos diferentes cenários de produção.

Mesmo na pior condição de operação, que é aquela na qual se opera com baixas temperaturas do ar e elevados fluxos de combustível, conforme observado na simulação S10B, observaram-se temperaturas na região próxima à parede do equipamento na ordem de 1090⁰C (1360 K). Logo, a aplicação da proposta de modificação 04 atende a todas as condições de operação.

5.4 COMPARAÇÃO ENTRE OS MELHORES RESULTADOS DAS MODIFICAÇÕES PROPOSTAS

Abaixo, encontram-se os resultados apresentados na forma de gráficos comparando-se os melhores resultados obtidos dentre todas as simulações realizadas em termos de menores valores de temperatura na região da falha, a fim de sugerir a melhor solução teórica a ser adotada.

O Gráfico 16 indica como melhor resultado a simulação S3B com o valor de temperatura de 1157K, com cerca de 14% de redução quando comparada com a temperatura obtida na simulação de referência das configurações originais do combustor, a S1E. Entretanto, devido ao erro inerente à modelagem não se pode, estatisticamente falando, afirmar que o resultado de 1176K obtido na simulação S5B é pior que o da S3B.



Fonte – Resultados do software CFX

Já o Gráfico 17 apresenta para a produção 01, aquela que caracteriza-se por ser uma das piores condições de operação da unidade, que tem a simulação S5B como sendo a de melhor resultado.



Fonte – Resultados do software CFX

Para a produção 02, também uma condição de operação extremamente desfavorável, a simulação S3B demonstrou-se como sendo a que apresentou as menores temperaturas na região da falha, como pode ser observado no Gráfico 18.



Fonte – Resultados do software CFX

Para a produção 03, a simulação S3B demonstrou ser a melhor configuração, conforme o Gráfico 19. Essa produção representa a melhor condição de operação do combustor e a que deve ser buscada como alvo de produção, uma vez que é a que apresenta a melhor eficiência energética da unidade, já que opera na produção máxima e com o menor consumo de combustível.

Entretanto, todas as modificações se mostraram eficientes na produção 03, mesmo a S4E, que apresentou valores na ordem de 1281K. Lembrando que essa simulação, da modificação 03, foi penalizada pela maior proximidade da região da falha com o queimador, mas por outro lado resultou como benefício a redução da velocidade do ar.



Fonte – Resultados do software CFX

Por fim, avalia-se a produção 04 no Gráfico 20, no qual mais uma vez a simulação S3B demonstrou ser a mais apropriada para esse tipo de configuração. Sendo assim, analisando-se os resultados apresentados, pode-se apontar a simulação S3B como sendo a configuração que, na teoria, caso seja implementada, dará os melhores resultados em todas as condições de operação e produção.



Fonte – Resultados do software CFX

6 CONCLUSÕES

As modelagens realizadas neste trabalho de tese ratificaram os resultados das análises químicas, da difração de raios X e da análise de refratariedade do material refratário, demonstrando que uma região específica do revestimento refratário na região superior do combustor foi submetida a temperaturas excessivas.

Observou-se, também, que essa grande área de temperatura elevada, que atingira valores acima do permitido, existia mesmo com o combustor operando a uma taxa de produção normal e com os parâmetros operacionais de acordo com o projetado.

Constatou-se que, para o mesmo fluxo de ar de combustão, o aumento do fluxo de combustível maximizava a zona quente no topo do equipamento. Logo, o seu mau funcionamento poderia ser reduzido por meio de qualquer estratégia de operação que priorizasse minimizar o fluxo de combustível e, consequentemente, a intensidade de calor no combustor.

Na configuração original do combustor, o fato de operar com uma maior temperatura do ar de combustão e um menor fluxo de combustível para o combustor reduz significativamente a zona afetada pelo calor e seria a condição mais segura de se operar a unidade.

Os resultados do CFD mostraram que existe uma relação inversa entre a velocidade do ar e a temperatura na região da parede do combustor, e que a geometria de entrada do topo do equipamento criou um fraco redemoinho dos gases de combustão, o que resultou em um núcleo de queima partindo do centro e atingindo regiões próximas a um dos lados da parede do combustor.

A modelagem em CFD mostrou-se bem alinhada com as observações de campo, para as condições avaliadas, e demonstrou que, caso o combustor tivesse sua geometria modificada de forma a acarretar um aumento de velocidade do fluxo de ar, provocaria uma força de centrifugação muito mais forte, resultando no deslocamento do núcleo da queima do combustível para mais próximo do centro do combustor, afastando-se para longe da parede.

Concluiu-se, também, que a solução de reduzir a entrada do ar no combustor e a solução de reduzir a entrada do ar em conjunto com a redução do domo são limitadas a

certas condições de operação da unidade, e que a dimensão do domo do combustor tem um impacto significativo na fluidodinâmica do equipamento.

Para finalizar, observou-se que tanto a opção de prolongar a entrada de ar quanto a opção de prolongar a entrada de ar em conjunto com a redução do domo apresentaram bons resultados e atenderam a todos os cenários de produção simulados. Teoricamente, a melhor solução foi obtida com a sugestão de prolongamento do duto de entrada. Porém, a melhor solução, de fato, só poderá ser determinada a partir da extrapolação do domínio de controle.

7 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Os resultados obtidos demonstram que a região de alta temperatura no topo do combustor poderia ser progressivamente reduzida a um impacto zero, e todo o conhecimento adquirido nesta pesquisa pode e deve ser utilizado em outros trabalhos, visando a otimizar a operação da unidade e também a desenvolver novos conceitos que, aplicados, reduziriam os custos de projeto, operação e manutenção. Ficam como sugestão para trabalhos futuros:

- Realizar uma análise paramétrica nas condições de pré-aquecimento da unidade, definindo a nova curva de aquecimento, visando a otimizar e a minimizar o fluxo de combustível para o combustor durante essa etapa, na qual se opera com valores de temperatura do ar abaixo da temperatura normal de operação.
- Utilizar os resultados das modelagens em CFD como valor de entrada na determinação do modelo de previsão da granulometria do produto.
- Utilizar o modelo do combustor de ar para desenvolver, em conjunto com os fornecedores de revestimento refratário, melhores matérias, garantindo maior resistência ao choque térmico e à erosão.
- Determinar qual a menor espessura de revestimento refratário que pode ser aplicada no combustor, reduzindo com isso os custos de manutenção das unidades existentes e também reduzindo o custo de implantação de novas unidades, uma vez que o refratário é responsável pelo maior custo de manutenção e figura entre os maiores custos de construção e montagem.

REFERÊNCIAS

1 EL-MAHALLAWY, F.; EL DIN HABIK, S. Fundamentals and Technology of Combustion. Oxford: Elsevier, 2002.

2 MULLINGER, P., JENKINS, B. **Industrial and Process Furnaces**: Principles, Design and Operation. Burlington: Elsevier, 2008.

3 REED, R. J. North American Combustion Handbook, 2. ed. Cleveland: North American Mfg. Co., 1983.

4 MARQUES, M.; HADDAD, J.; MARTINS, A. R. S. **Conservação de energia:** eficiência energética de equipamentos e instalações. Itajubá: FUPAI, 2006.

5 WINTERBONE D. E., TURAN A.. Advanced Thermodynamics for Engineers. Oxford: Elsevier, 2015.

6 ENGINEERING SIMULATION SCIENTIFIC SOFTWARE. ANSYS CFX – Curso Introdutório. ESSS, 2012.

7 ANSYS, INC. ANSYS CFD, Release 13.0. 2010.

8 CFD-ONLINE. Introduction to Computational Fluid Dynamics, by CHAM Disponível em: http://www.cfd-online.com/Links/onlinedocs.html#cfdintros. Acesso em: 22 fev. 2014.

9 ANSYS, INC. Realize Your Product Promise, Ansys Fluid Dynamics. 2011.

10 VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics the Finite Volume Method. New York: Longman, 1995.

11 ZINGG, D. W.; LOMAX, H.; PULLIAM, T. H. **Fundamentals of Computational Fluid Dynamics.** Berlin: Springer-Verlag, 2001.

12 MANUAL ANSYS **CFX** v.13.0.

13 CASTIÑEIRA, D.; EDGAR, T. F. Computational Fluid Dynamics for Simulation of Wind-Tunnel Experiments on Flare Combustion Systems. **Energy and Fuels**, v. 22, n. 3, p. 1698-1706, May 2008.

14 BAUKAL JR; CHARLES, E. **Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion.** Boca Raton, London, New York, Washington: CRC Press, 2001. Disponível em: <<u>https://books.google.com.br/books?hl=pt-</u> <u>BR&Ir=&id=YISbCgjjLrcC&oi=fnd&pg=PA3&dq=Baukal+%E2%80%9Ccomputational+Fl</u> <u>uid+Dynamics+in+Industrial+Combustion%E2%80%9D&ots=C8S8dW74yN&sig=HipInn</u> <u>7xyfavyp7MR1xNxmIbm1s#v=onepage&q&f=false</u>> Acesso em: 11 abr. 2014.

15 SAARIO, A., et al. Heavy Fuel Oil Combustion in a Cylindrical Laboratory Furnace: Measurements and Modeling. **Fuel**, v. 84, p. 359-369, 2005.

16 BARREIROS, A. et al. Prediction of the Near Burner Region and Measurements of NOx and Particulate Emissions in Heavy fuel Oil Spray flames. **Combustion and Flame**, v. 92, n. 3, p. 231-240, Feb. 1993.

17 FURUHATA, T. et al. Performance of Numerical Spray Combustion Simulation. **Energy Conversion and Management**, v. 38, n. 10-13, p. 1111-1122, July-Sept. 1997.

18 LIU, D. et al. Numerical Simulation of High Temperature Air Combustion in Aluminum Hydroxide Gas Suspesion Calcinations. **Trans. Nonferrous Met. Soc. China**, v. 19, p. 259-266, 2009.

19 WU, S.; CHANG, W.; CHIAO, J. Low NOx Heavy Fuel Oil Combustion with High Temperature Air. **Fuel**, v. 86, p. 820–828, 2007.

20 ZARNESCU, V.; PISUPATI, S.V. An Integrative Approach for Combustor Design Using CFD Methods. **Energy Fuels**, v. 16, n. 3, p. 622-633, 2002.

21 CHACÓN, J.; SALA, J. M.; BLANCO, J. M. Investigation on the Design and Optimization of Low NOx-CO Emission Burner Both Experimentally and through Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulations. **Energy Fuels**, v. 21, n. 1, p. 42-58, 2007.

22 ANDERSEN, J. et al. Global Combustion Mechanism for Use in CFD Modeling under Oxy-Fuel Conditions. **Energy & Fuels**, v. 23, n. 3, p. 1379-1389, 2009.

23 FIDAROS, D. K. et al. Modelling of Combustion and Calcination in a Cement Precalciner. 2007.

24 STEFANIDIS, G. D. et al. CFD Simulations of Steam Cracking Furnaces Using Detail Combustion Mechanisms. **Computers and Chemical Engineering**, v. 30, p. 635-649, 2006.

25 KIM, H. K.; KIM, Y. Studies on Combustion Characteristics and Flame Length of Turbulent Oxy-Fuel Flames. **Energy Fuels**, v. 21, n. 3, p. 1459-1467, 2007.

26 GUAHK, Y. T. et al. Flame-Intrinsinc Kelvin-Helmholtz Instability of Flickering Premixed Flames. **Energy Fuels,** v. 23, n. 8, p. 3875-3884, 2009.

27 WANG, S. et al. Modeling of pulverized coal combustion in cement rotary kiln. **Energy & Fuels**, v. 20, p. 2350-2356. 2006.