

## VALIDAÇÃO DA MODELAGEM COMPUTACIONAL PARA QUEIMA DE CARVÃO

Raul VANZ<sup>1</sup>; Diogo Â. STRADIOTO<sup>2</sup>; Paulo S. SCHNEIDER<sup>3</sup>; Maria L. S. INDRUSIAK<sup>4</sup>; Cristiano V. da SILVA<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões, raul.vanz@yahoo.com.br; <sup>2</sup>Universidade Federal do Rio Grande do Sul, diogo.stradioto@apsengenharia.com.br; <sup>3</sup>Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pss@mecanica.ufrgs.br; <sup>4</sup>Universidade Federal do Rio Grande do Sul, msperbindrusiak@gmail.com; <sup>5</sup>Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões, cristiano@uricer.edu.br.

### RESUMO

Neste estudo foi realizada uma investigação numérica sobre o comportamento radiativo no processo de combustão de carvão pulverizado em uma instalação de ensaio de combustão (CTF) de 0,5 MW, equipada com um queimador IFRF (*International Flame Research Foundation*) *Aerodynamically Air Staged Burner* (AASB). Este estudo foi realizado considerando o método dos volumes finitos utilizando como ferramenta de simulação o *software* Ansys CFX v.15. Foi implementada uma modelagem de combustão baseada numa abordagem lagrangeana/euleriana considerando as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas para um escoamento multifásico, reativo e turbulento, a fim de representar a queima de partículas de carvão no interior da fornalha do reator. Os resultados obtidos apresentam boa concordância com dados experimentais disponíveis na literatura, sendo que a validação é feita através de comparação do fluxo de absorção de radiação medido nas paredes da fornalha do CTF.

**Palavras-chave:** Combustão, Carvão, CFD, Radiação.

### ABSTRACT

*In this study a numerical investigation was carried out on the radiative behavior in the pulverized coal combustion process in a 0.5 MW combustion test facility (CTF) equipped with an IFRF (International Flame Research Foundation) Aerodynamically Air Staged Burner (AASB). This study was performed considering the finite volume method using the Ansys CFX v.15 software as the simulation tool. A combustion model based on a Lagrangean / Eulerian approach was implemented considering the conservation equations of mass, momentum, energy and chemical species for a multiphase, reactive and turbulent flow, in order to predict the burning of coal particles inside the reactor furnace. The results obtained show good agreement with experimental data available in the literature, and the validation is done by comparing the absorbed radiation flux measured in the furnace walls of the CTF.*

**Key-Words:** Combustion, Coal, CFD, Radiation

### 1 INTRODUÇÃO

Pesquisas recentes comprovam que o aquecimento global está realmente em curso. Fica evidente, através de observações, em relação aos aumentos na temperatura média global do ar e dos oceanos, derretimento generalizado de neve e gelo e o aumento do nível médio dos oceanos, que a situação é muito séria. O último relatório do *Intergovernmental Panel on Climate Change* (IPCC) (2014) é bastante alarmante no sentido de que, desde o início da era industrial, a temperatura média da Terra aumentou 0,74°C e o nível do mar aumentou

entre 10 e 20 cm. Observam-se as consequências iniciais dessa mudança com as perturbações climáticas, o derretimento dos fluxos de gelo e geleiras, o deslocamento de populações e as mudanças na flora e na fauna. Com base em dados disponíveis, existe uma indiscutível concordância de que a causa destes fenômenos se deve ao aumento do nível dos chamados gases de efeito estufa na atmosfera. O principal suspeito é o dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) produzido, principalmente, na queima de combustíveis fósseis. Pesquisas sugerem que até o final deste século, o aumento médio da temperatura

da Terra pode chegar a 6,3°C (CZERNICHOWSKI-LAURRIOL *et al.*, 2007). Acredita-se que um aumento de no máximo 2°C garanta que alterações climáticas catastróficas sejam evitadas. Para atingir este desígnio, concentrações de gases de efeito estufa não devem exceder 450 ppm, isto é, não devem aumentar mais de 18% em relação às concentrações atuais.

Neste cenário, um motivo que tem atraído muitos estudos é o desenvolvimento de tecnologias para a produção de energia elétrica com o mínimo impacto ambiental possível, principalmente no que diz respeito às emissões de dióxido de carbono na atmosfera, como visto, principal causador do efeito estufa. No entanto, o aumento da produtividade ainda está relacionado à utilização de combustíveis fósseis, tais como o carvão mineral, gás natural e derivados do petróleo. Dessa forma, a busca por novos métodos para atender a essas exigências é de ampla importância. Assim, processos convencionais de queima, seja de carvão ou outro combustível fóssil, precisam ser melhorados e, se possível, substituídos pelo uso de técnicas mais eficientes.

No entanto, para se atingir o completo domínio da aplicação de novas tecnologias nos processos de combustão e obter resultados realmente satisfatórios, faz-se necessário uma intensa busca por maiores informações sobre o processo de queima. Nesse sentido, o desenvolvimento de modelagens mais completas do processo para a utilização de simulação numérica aparece como uma ferramenta bastante eficaz para a realização destes estudos.

Existem diversas formas de avaliar os processos de combustão em fornalhas e geradores de vapor, porém poucas proporcionam um custo relativamente baixo e atingem respostas desejadas. Análises experimentais tornam-se inviáveis em razão da escala dos equipamentos e da instrumentação que deve ser aplicada nas centrais, sendo a adequação custosa e complexa. Neste âmbito, a análise de processos de combustão com ferramentas de dinâmica dos fluidos computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) torna-se um instrumento eficaz para a avaliação dos processos complexos e que envolvem muitas variáveis, como no caso da co-combustão, tendo-se como principais objetivos a compreensão dos fenômenos envolvidos, a melhoria da eficiência dos equipamentos atualmente em operação e a diminuição das emissões de poluentes. Através da análise em CFD é possível relacionar nos cálculos uma grande

quantidade de detalhes, tanto geométricos quanto de processos, obtendo-se soluções cada vez mais próximas das reais situações de operação (Silva *et al.*, 2010).

Eaton *et al.* (1999) apresentaram uma revisão de modelos de combustão. Os modelos são baseados nas equações fundamentais de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas, sendo que a turbulência é resolvida por modelos de duas equações como o  $k-\epsilon$  (LAUNDER e SHARMA, 1974); os modelos de combustão são baseados na cinética de Arrhenius (KUO, 2005; TURNS, 2000) ou modelos de combustão rápida como o de Magnussen – EBU – *Eddy Break-Up* (MAGNUSSEN e HJERTAGER, 1976). A radiação térmica é tratada pelo método de ordenadas discretas para a solução da equação de transferência radiante – *Radiative Transfer Equation* – RTE (CARVALHO *et al.*, 1991). Ainda, outros modelos para desvolatilização e combustão de combustíveis sólidos e líquidos, considerando emissão de poluentes como o NO<sub>x</sub> (óxidos de nitrogênio), são avaliados.

Silva *et al.* (2010) analisaram por meio de CFD o processo de combustão de carvão mineral pulverizado em uma caldeira de uma usina de 160 MW de geração elétrica, com a finalidade de identificar as ineficiências presentes no equipamento. A modelagem proposta pelos autores abrangia as equações fundamentais de conservação, modelo de turbulência  $k-\omega$  e o modelo das reações químicas *Eddy Break-Up Arrhenius* e a radiação térmica em meios participantes. Com os resultados obtidos, foi concluído que a modelagem computacional adotada foi eficiente para representar o processo real de operação do gerador de vapor em questão.

Smart *et al.* (2010) fizeram uma análise experimental em uma instalação de ensaio de combustão, equipada com um queimador aerodinâmico IFRF, em escala piloto de 0,5 MW, sob diferentes condições de oxi-combustão e co-combustão. A análise consistiu em variar a relação de reciclagem – *Recycle Ratio* – RR. Apresentaram-se os resultados das medidas de transferência de calor por radiação, fluxos convectivos e dados de *burnout*. Os resultados mostraram que o fluxo de calor radiativo de pico mais alto e a luminosidade de chama mais alta corresponderam à relação de reciclagem mais baixa. O efeito da co-combustão da biomassa resultou em fluxos radiativos de calor mais baixos para razões de reciclagem correspondentes. Além

disso, os níveis mais elevados de fluxo de calor radiativo corresponderam ao menor fluxo de calor convectivo. Os resultados são comparados com a queima convencional, com ar atmosférico, e os fluxos de calor radiativo e convectivo são dependentes do tipo de combustível. O *burnout* melhora com a co-queima da biomassa sob condições de queima de ar e oxi-combustão, e o *burnout* também melhora em condições de queima de oxi-combustão em comparação com a queima em ar atmosférico.

Naser e Bhuiyan (2015) utilizaram uma modelagem computacional para descrever o processo de combustão de carvão Russo sob condições de ar e de oxi-combustão. Este estudo destacou os possíveis efeitos da variação do combustível no ambiente de ignição e as características da transferência de calor de uma fornalha de pequeno porte. Os resultados foram apresentados em termos de distribuições de temperatura, concentrações de  $\text{CO}_2$ , e os efeitos da queima em diferentes RR (*Recycled Ratio*). Os resultados mostram que o fluxo de calor radiativo e convectivo é significativamente manipulado pelo RR. A posição do pico de fluxo radiativo move-se para jusante com RR crescente devido ao aumento taxa de fluxo de massa e  $\text{O}_2$  reduzido a um RR mais elevada. Com o aumento do fluxo total, a temperatura média da chama e a temperatura de saída dos gases produtos da combustão diminuíram, enquanto que com o aumento do fluxo de  $\text{O}_2$ , a temperatura média da chama e a temperatura de saída destes gases aumentaram. O intervalo de trabalho apresentado para o carvão Russo sugere que o fluxo de calor radiativo equivalente a queima com ar pode ser obtido com um RR de 71% enquanto que a temperatura da chama equivalente na queima em ar foi observada em RR de 72%. Os resultados foram validados comparando-se com os dados experimentais obtidos por Smart *et al.* (2010). Boa concordância foi observada com diferenças na faixa de 5 a 10%, comparado com os dados experimentais.

Para o presente trabalho apresenta-se, utilizando-se o software comercial Ansys CFX 15, um estudo numérico da combustão de carvão Russo pulverizado, onde a modelagem desenvolvida pelo Laboratório de Simulação Numérica (LABSIM) é implementada sobre a geometria de uma fornalha para testes de combustão de escala laboratorial apresentada por Smart *et al.* (2010), com capacidade de 0,5 MW, tendo como objetivo principal avaliar o campo de temperaturas e de velocidades no interior

da câmara de combustão, assim como a transferência de calor por radiação térmica nas paredes desta câmara, comparando-se os dados obtidos nas simulações com os dados experimentais apresentados por Smart *et al.* (2010), a fim de validar a modelagem.

## 2 COMBUSTÃO DO CARVÃO

A modelagem da combustão de carvão bruto pulverizado é considerada para a determinação da temperatura, concentração de espécies químicas e campos de velocidade tanto da mistura gasosa como para as partículas de carvão bruto, cinzas e o carbono residual das partículas, verificando-se a influência dos parâmetros operacionais, como condições heterogêneas para o combustível e o escoamento de ar no combustor durante a queima.

O esquema cinético para a pirólise de partículas de carvão utilizado neste trabalho, apresentada por Silva *et al.* (2010), a qual segue o modelo proposto por Ubayakar *et al.* (1976), e assume que o carvão mineral é composto de carvão bruto (*raw coal*), cinza (*ash*) e água (umidade). O carvão bruto decompõe-se em carbono residual e gases voláteis através de duas reações paralelas e concorrentes de desvolatilização ( $R_{1,c}$  e  $R_{2,c}$ , ver Figura 1), onde duas diferentes taxas de reação com diferentes rendimentos de desvolatilização competem, a fim de gerar a pirólise do carvão, representado na Figura 2. As cinzas e a água presentes na partícula de carvão podem ser consideradas como impurezas do carvão pois não produzem energia.

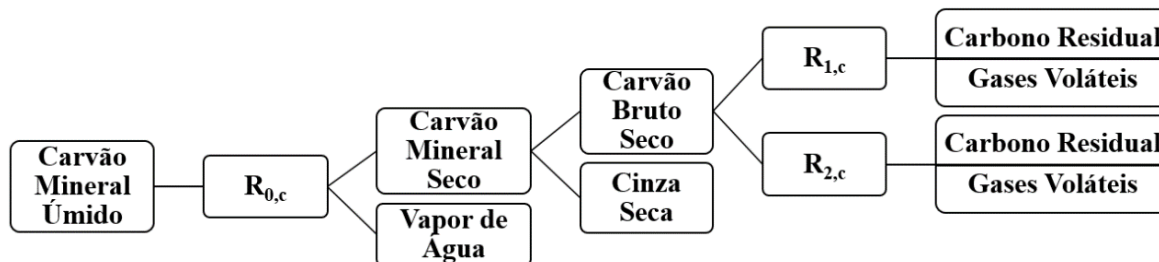
Neste trabalho foi implementado um modelo para prever a secagem das partículas de carvão proposto por Xianchun *et al.* (2009). Este modelo estabelece que a partícula úmida de carvão sofre uma reação química prescrita pelo modelo de Arrhenius de evaporação da água presente na partícula a uma temperatura de 373 K, resultando em carvão seco e vapor de água. Este modelo foi introduzido na programação do problema no Ansys como sendo uma reação química ( $R_{0,c}$ ), a qual pode ser observada na Figura 2.

As constantes cinéticas empregadas na reação de secagem e de desvolatilização das partículas de carvão adotadas neste trabalho, ou seja, o fator pré-exponencial e a energia de ativação são mostradas na Tabela 1.

Tabela 1 – Constantes cinéticas para as equações envolvendo o carvão.

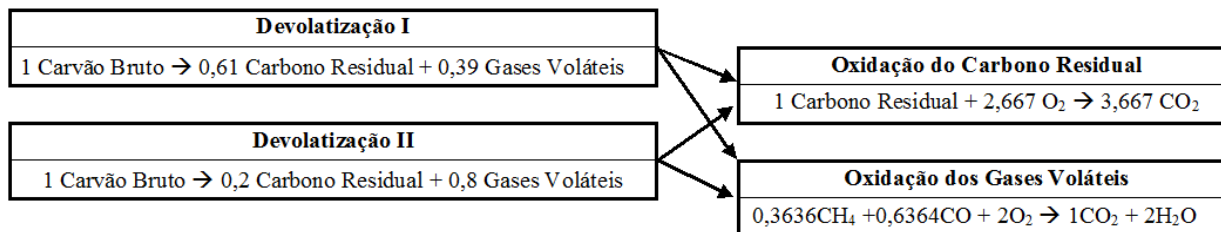
| Reação    | $A_r$                                                             | $E$            |
|-----------|-------------------------------------------------------------------|----------------|
| $R_{0,c}$ | $4,5874 \times 10^{12} [\text{kg}^{-2}.\text{m}^6.\text{s}^{-1}]$ | 78.995 [J/mol] |
| $R_{1,c}$ | $1,34 \times 10^5 [\text{s}^{-1}]$                                | 8.852 [K]      |
| $R_{2,c}$ | $1,46 \times 10^{13} [\text{s}^{-1}]$                             | 30.189 [K]     |

Figura 1 - Modelo de pirólise do carvão com secagem.



Fonte: adaptado de Velicko *et al.* (2015).

Figura 2 - Esquema de reações químicas do carvão bruto. Na figura, CH<sub>4</sub> é o metano, O<sub>2</sub> é o gás oxigênio, CO<sub>2</sub> o dióxido de carbono e H<sub>2</sub>O o vapor d'água.



Fonte: Ubayakar *et al.* (1976) *apud* Silva *et al.* (2010).

### 3 EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

#### 3.1 CONSERVAÇÃO DE MASSA E ESPÉCIES QUÍMICAS

A conservação de massa de cada elemento é concedida em função de sua própria equação da média de Favre (KUO, 2005), na qual, considerando escoamento multifásico em regime estacionário e incompressível, pode ser escrita em notação tensorial por meio de

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_\alpha \tilde{U}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho_\alpha (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) + \bar{\rho}_\alpha \tilde{U}_j \right) + S_\alpha \quad [\text{Eq. 01}]$$

onde  $\bar{\rho}_\alpha$  é a massa específica média ponderada pela massa do componente fluido  $\alpha$  na mistura,  $\tilde{U}_j = \frac{\sum(\bar{\rho}_\alpha \tilde{U}_{ij})}{\bar{\rho}}$  é o campo de velocidade média na

mistura em  $j$ , ponderado pela massa específica;  $\bar{\rho}$  é a massa específica média temporal em  $e$  e  $\tilde{U}_{ij}$  é a velocidade média em  $ij$ . Ainda,  $x$  é a coordenada espacial, o termo  $\rho_\alpha (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j)$  representa o fluxo mássico relativo, onde  $\rho_\alpha$  é a massa específica do componente  $\alpha$  da mistura. Por fim,  $S_\alpha$  é o termo fonte para o componente  $\alpha$ , o qual inclui os efeitos das reações químicas. Se em todas as equações representadas pela Eq. 01 são acrescentados componentes globais, e o termo fonte é prescrito como zero, tem-se a equação convencional da continuidade. O termo de fluxo mássico relativo é considerado para o movimento diferencial de componentes individuais. Nesse estudo, esse termo é modelado para o movimento relativo dos componentes da mistura e o principal efeito é o do gradiente de concentração, conforme

$$\rho_{\alpha}(\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) = -\frac{\rho D_{\alpha}}{\bar{\rho}} \times \frac{\partial \tilde{\rho}_i}{\partial x_j} \quad [\text{Eq. 02}]$$

onde  $D_{\alpha}$  é a difusividade mássica. A fração mássica média do componente  $\alpha$ ,  $\tilde{Y}_{\alpha}$ , é definida como

$$\tilde{Y}_{\alpha} = \frac{\tilde{\rho}_{\alpha}}{\bar{\rho}} \quad [\text{Eq. 03}]$$

Substituindo as Eqs. 02 e 03 na Eq. 01 e modelando os termos turbulentos escalares supondo uma dissipação turbulenta, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Y}_{\alpha}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \rho D_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_j} \right] + S_{\alpha} \quad [\text{Eq. 04}]$$

onde  $Sc_t$  é o número de Schmidt turbulento e  $\mu_t$  a viscosidade turbulenta. Percebe-se que a soma dos membros de frações mássicas com todos os componentes é unitária.

### 3.2 CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

A conservação da quantidade de movimento para o escoamento do fluido é obtida por meio de médias de Favre como

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j) = -\frac{\partial p^*}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial x_j \partial x_i} + \bar{S}_U \quad [\text{Eq. 05}]$$

onde  $\tilde{U}_i$  é a velocidade média ponderada pela massa em  $i$ ,  $p^*$  é a pressão modificada definida por  $p^* = \bar{p} - \left( \frac{2}{3} \right) k$ ;  $\delta_{ij}$  é a função delta de Kronecker,  $\mu_{eff}$  é a viscosidade efetiva, definida como a soma da viscosidade dinâmica ( $\mu$ ) com a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ). Ainda, tem-se  $\tilde{U}$  como a velocidade média ponderada pela massa e  $\bar{S}_U$  é o termo fonte, inserido para modelar o empuxo, a força de arrasto gerada pelo transporte de partículas, e outros termos matemáticos gerados pelos modelos de turbulência. O modelo de Boussinesq foi empregado para representar a força de empuxo provocada pelas variações de densidade e o modelo  $k-\epsilon$  foi aplicado para descrever a turbulência no escoamento.

### 3.3 CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

O transporte de energia em função da difusão de cada espécie química pode ser determinado por meio de médias de Favre:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k_{cond} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{\alpha} \tilde{h}_{\alpha} \left( \rho D_{\alpha} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_j} + c_p \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_{rad} + \bar{S}_{rea} + \bar{S}_T \quad [\text{Eq. 06}]$$

onde  $\tilde{h}$  é a entalpia específica média,  $k_{cond}$  é a condutividade térmica,  $\tilde{T}$  é a temperatura média,  $\tilde{h}_{\alpha}$  é a entalpia específica média do componente  $\alpha$ ,  $c_p$  é o calor específico, que é determinado pelo somatório do calor específico ( $c_{p,\alpha}$ ) com a média da fração mássica das  $\alpha$ -espécies químicas constituintes da mistura;  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento,  $N_c$  e  $\alpha$  representam os índices do somatório, sendo que o CFX-Solver resolve  $N_c - \alpha$  equações de fração mássica, para todos, exceto um componente. Este componente é classificado como de restrição, pois sua fração mássica é determinada em função de completar o balanço total, ou seja, a unidade. Os termos  $\bar{S}_{rad}$ ,  $\bar{S}_{rea}$  e  $\bar{S}_T$  representam as fontes de energia térmica devido a transferência por radiação, pelas reações químicas e sumidouro de energia, respectivamente. A variável  $\bar{S}_{rea}$  pode ser obtida por meio de:

$$\bar{S}_{rea} = \sum_{\alpha} \left[ \frac{h_{\alpha}^0}{MM_{\alpha}} + \int_{\tilde{T}_{ref,\alpha}}^{\tilde{T}} c_{p,\alpha} d\tilde{T} \right] \times \bar{R}_{\alpha} \quad [\text{Eq. 07}]$$

onde  $\alpha$  é um subscrito que indica que a quantidade aplica-se à espécie  $\alpha$ . Ainda,  $h_{\alpha}^0$  é a entalpia específica de formação,  $MM_{\alpha}$  é a massa da mistura molecular do componente  $\alpha$ ,  $\tilde{T}_{ref,\alpha}$  é a temperatura média de referência das  $\alpha$ -espécies químicas e  $\bar{R}_{\alpha}$  é a taxa de formação ou destruição das espécies químicas. Para completar o modelo, a massa específica da mistura pode ser obtida a partir da equação do estado de um gás ideal (KUO, 2005; TURNS, 2000):

$$\bar{\rho} = p \overline{MM} (\bar{R} \tilde{T})^{-1} \quad [\text{Eq. 08}]$$

onde  $p$  é a pressão operacional da câmara de combustão em [Pa]. As Eqs. 07 e 08 são válidas apenas no núcleo de turbulência, onde  $\mu_t \gg \mu$ . Próximo à parede, a lei convencional logarítmica foi utilizada (NIKURADSE, 1933).

### 3.4 MODELO DE REAÇÕES QUÍMICAS E–A (EDDY BREAK UP – ARRHENIUS)

No presente trabalho, os modelos *Eddy Dissipation* e *Finite Rate Chemistry* foram combinados para prever as reações de combustão, assim, a taxa efetiva de reação é assumida como o valor mínimo de ambos os modelos.

O modelo *Eddy Break Up* é baseado em uma análise fenomenológica de combustão turbulenta assumindo elevados números de Reynolds e Damkohler. Trata-se de uma combinação dos dois modelos listados acima, sendo a taxa limite o menor valor entre as taxas de reações químicas calculada por ambos. O modelo reduzido de reações químicas utilizado neste trabalho assume taxas finitas de reações químicas. Além disso, considera-se que a oxidação seja uma combinação de queima difusiva e com pré-mistura, ocorrendo em duas etapas globais de reações químicas, envolvendo apenas seis espécies principais: O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e CO.

Uma equação de conservação é necessária para cada espécie química, exceto o nitrogênio. Por este motivo, têm-se a equação da conservação dada pela Eq. (3.10), onde o termo fonte,  $S_i$ , considera a taxa média volumétrica para formação ou destruição das espécies em todas as reações químicas. Este termo é calculado a partir da soma das taxas volumétricas de formação ou destruição em todas as equações onde as espécies estão presentes,  $\bar{R}_{\alpha,k}$ , onde os subscritos referem-se as espécies e reações, respectivamente. Com isso,  $\bar{R}_{\alpha} = \sum_k \bar{R}_{\alpha,k}$ , e a taxa de formação ou destruição,  $\bar{R}_{\alpha,k}$ , foi obtida por meio de um modelo combinado *Eddy Break Up – Arrhenius*, o *EBU-Arrhenius* (EATON *et al.*, 1999). Tais relações são apropriadas para uma grande gama de aplicações, como por exemplo, reações químicas em escoamentos laminares ou turbulentos, com ou sem pré-mistura.

Utilizando esta formulação, Silva *et al.* (2007) simularam o processo de combustão de metano e ar em uma câmara cilíndrica obtendo bons resultados. Posteriormente, Silva *et al.* (2010) analisaram o processo de combustão de carvão e ar em uma câmara de combustão de uma central termelétrica obtendo resultados satisfatórios entre as simulações e os valores reais de operação da câmara de combustão, comprovando a eficácia da presente formulação.

### 3.5 MODELO DE TURBULÊNCIA $k - \varepsilon$

O modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  é o modelo mais difundido entre os usuários de CFD para simular características de fluxo médio para condições de fluxo turbulento. É um modelo que dá uma descrição geral da turbulência por meio de duas equações de transporte.

A primeira equação determina a energia na turbulência e é chamada de energia cinética turbulenta ( $k$ ),

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k U_i) = \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + [Eq. 09]$$

$$+ P_k + P_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$

A segunda equação, para  $\varepsilon$ , determina a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta transportada. Assim,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon U_i) = \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + [Eq. 10]$$

$$+ C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (P_k + C_{3\varepsilon} P_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$

onde  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$  e  $C_{3\varepsilon}$  são constantes empíricas adimensionais do modelo de turbulência;  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são as constantes adimensionais do modelo de turbulência,  $P_k$  é o termo que representa a taxa de produção de turbulência devido às forças viscosas,  $P_b$  representa o efeito das flutuações devido à turbulência,  $S_k$  é o módulo do tensor da taxa média de deformação  $k$  e  $S_\varepsilon$  é o módulo do tensor da taxa média de deformação  $\varepsilon$ . O valor das constantes descritas acima podem ser encontrados na Tabela 2.

Tabela 2 – Constantes do modelo  $k - \varepsilon$

| Constante            | Valor |
|----------------------|-------|
| $C_{1\varepsilon}$   | 1,44  |
| $C_{2\varepsilon}$   | 1,92  |
| $C_{3\varepsilon}$   | -0,33 |
| $C_\mu$              | 0,09  |
| $\sigma_k$           | 1,0   |
| $\sigma_\varepsilon$ | 1,3   |

Fonte: Launder e Sharma (1974)

### 3.6 MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO – DTRM

O DTRM (*Discrete Transfer Radiation Model* – Modelo de Radiação de Transferência Discreta)

assume que a radiação que deixa a superfície de um elemento em uma determinada gama de ângulos sólidos pode ser aproximada pelo comportamento de um único raio (ANSYS, 2009). A equação para a variação da intensidade radiante ( $I$ ) ao longo do percurso ( $s$ ), é definida por:

$$\frac{dI}{ds} + k_i I = \frac{k_i \sigma T^4}{\pi} \quad [\text{Eq. 11}]$$

onde  $k_i$  representa o coeficiente de absorção gasosa,  $T$  representa a temperatura local do gás em,  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann, no valor de  $5,67 \times 10^{-8} \text{ [W/m}^2\text{.K}^4\text{]}$ . Em função da quantidade de partículas no domínio, tanto de cinzas como de carvão, onde tem-se a chama propriamente dita (zonas de altas temperaturas) considera-se o meio como difuso e assim, opta-se por não considerar o efeito do espalhamento para a radiação térmica. Não se considera para este trabalho a formação da fuligem, sem sua contribuição para a transferência de calor por radiação, novamente pelo domínio estar com grande quantidade de partículas.

O DTRM integra a Eq. 11 ao longo de uma série de raios, logo, se  $\alpha$  é constante ao longo do raio,  $I(s)$  pode ser determinada por:

$$I(s) = \frac{\sigma T^4}{\pi} \times (1 - e^{-k_i s}) + I_0 e^{-k_i s} \quad [\text{Eq. 12}]$$

onde  $I_0$  é a intensidade de radiação no início do percurso incremental, o qual é determinado pela condição de contorno apropriada (ANSYS, 2009). A fonte de energia no fluido devido a radiação é então calculada assumindo-se a mudança da intensidade ao longo do percurso para cada raio, que é rastreado através do volume de controle. A acurácia deste modelo é limitada em relação ao número de raios utilizados, sendo que para o presente trabalho 16 raios foram ajustados no Ansys CFX.

### 3.7 MODELO ESPECTRAL – WSGGM (WEIGHTED SUM OF GRAY GASES)

No modelo espectral para a contribuição da radiação em meios participantes WSGG (*Weighted Sum of Gray Gases*, ou Soma Ponderada de Gases Cinza), a absorção radiativa e a emissão a partir dos gases pode ser caracterizada pela emissividade como função da temperatura e do produto da pressão parcial pelo comprimento do percurso. No caso do presente trabalho, que envolve processo de

combustão, os principais gases responsáveis pela emissão de radiação são o dióxido de carbono e o vapor d'água. Hottel e Sarofim (1967 *apud* ANSYS, 2009) publicaram gráficos contendo os valores para a emissividade do  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , demonstrando que esta variável possui forte dependência na pressão parcial e comprimento do percurso, porém uma fraca dependência na temperatura do gás. De acordo com os pesquisadores, esta dependência funcional pode ser relacionada assumindo-se que a emissividade surge como resultado da emissão independente de um número suficiente de gases cinza:

$$\varepsilon_g = \sum_{i=1}^{Ng} a_{gi} (1 - e^{-k_i L p_i}) \quad [\text{Eq. 13}]$$

onde  $\varepsilon_g$  é a emissividade do gás,  $Ng$  é o número de gases cinza,  $i$  refere-se a primeira ordem do somatório (índice inferior),  $a_{gi}$  é a fração do espectro de energia relativa à energia de um corpo negro,  $L$  é o comprimento do percurso e  $p_i$  é a pressão parcial.

A variável  $a_{gi}$  pode ser calculada por (HOTTEL e SAROFIM, 1967):

$$a_{gi}(T) = \sum_{j=0}^j b_{ij} \times T^j \quad [\text{Eq. 14}]$$

onde  $j$  representa os índices do somatório,  $b_{ij}$  os coeficientes polinomiais  $[\text{K}^{-j}]$ , sendo o subscrito  $i$  referente ao gás cinza e  $j$  à ordem, e  $T^j$  diz respeito à temperatura do gás na ordem  $j$   $[\text{K}]$ .

Para a parcela transparente, garantindo que a energia radiativa é conservada, tem-se:

$$a_0(T) = 1 - \sum_{i=1}^I a_{gi}(T) \quad [\text{Eq. 15}]$$

onde  $i$  e  $I$  são os índices inferior e superior do somatório, respectivamente, e  $a_0$  refere-se a parcela transparente da fração do espectro de energia. Com isso, assume-se os coeficientes obtidos por Dorigon *et al.* (2013), avaliados para queima de metano, para uma razão de  $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$ , mesmo que esta razão das pressões parciais previstas na Figura 2 não seja exatamente 2. Estes coeficientes são mostrados na Tabela 3.

Para o presente trabalho ainda foi considerado um quinto gás, o qual foi inserido na modelagem para levar em consideração a janela transparente, ou seja, os comprimentos de onda que não são afetados pelo meio.

Tabela 3 – Coeficientes do modelo WSGG para  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ .

| Gás | $k_i$ [atm <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup> ] | $b_{i,0}$ [-] | $b_{i,1}$ [K <sup>-1</sup> ] | $b_{i,2}$ [K <sup>-2</sup> ] | $b_{i,3}$ [K <sup>-3</sup> ] | $b_{i,4}$ [K <sup>-4</sup> ] |
|-----|--------------------------------------------|---------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| 1   | 1,921E-01                                  | 5,617E-02     | 7,844E-04                    | -8,563E-07                   | 4,246E-10                    | -7,440E-14                   |
| 2   | 1,719E+00                                  | 1,426E-01     | 1,795E-04                    | -1,077E-08                   | -6,971E-11                   | 1,774E-14                    |
| 3   | 1,137E+01                                  | 1,362E-01     | 2,574E-04                    | -3,711E-07                   | 1,575E-10                    | -2,267E-14                   |
| 4   | 1,110E+02                                  | 1,222E-01     | -2,327E-05                   | -7,492E-08                   | 4,275E-11                    | -6,608E-15                   |

Fonte: Dorigon *et al.* (2013).

#### 4 MODELO FÍSICO E CONDIÇÕES DE CONTORNO

Os dados considerados neste estudo representam a operação de uma Instalação de Ensaio de Combustão (CTF – *Combustion Test Facility*) horizontal em escala piloto de 0,5 MW operando com combustão de carvão Russo pulverizado, com propriedades mostrada na Tabela 4, sob condição de queima em ar atmosférico. Adota-se a mesma geometria e condições de contorno propostas para a fornalha apresentada por Naser e Bhuiyan (2015).

Tabela 4 – Propriedades do carvão Russo utilizado no estudo.

| Combustível                     | Carvão Russo |
|---------------------------------|--------------|
| <i>Análise aproximada (%ar)</i> |              |
| Matéria volátil                 | 33,55        |
| Teor de cinzas                  | 11,98        |
| Carbono fixo                    | 48,27        |
| Umidade Total                   | 6,23         |
| <i>Análise exata (%ar)</i>      |              |
| Conteúdo de C                   | 65,91        |
| Conteúdo de H                   | 4,59         |
| Conteúdo de N                   | 2,09         |
| Conteúdo de S                   | 0,34         |
| Conteúdo de O                   | 8,89         |
| Poder calorífico [kJ/kg]        | 27098        |

Fonte: adaptado de SMART *et al.* (2010).

A fornalha em estudo, mostrada na Figura 3, consiste em uma seção quadrada de 0,8 m, forrada em cerâmica, com 4 m de comprimento, seguida de uma seção convergente com 2,18 m de comprimento levando a uma seção de saída quadrada de 0,3 m,

equipada com uma versão reduzida de um queimador IFRF (*International Flame Research Foundation*), onde combustível e oxidante entram no domínio pelas entradas primária e secundária, respectivamente.

As temperaturas na entrada primária e secundária foram mantidas a 70°C e 270°C, respectivamente. O número de *swirl* tem um efeito significativo na combustão e foi gerado na entrada secundária, sendo mantido constante e igual a 0,6 para todos os casos. As paredes da fornalha foram modeladas como resistências térmicas dadas por Stechly *et al.* (2014) com os respectivos valores mostrados na Tabela 5, assumindo emissividade igual a 0,85 para todas as paredes.

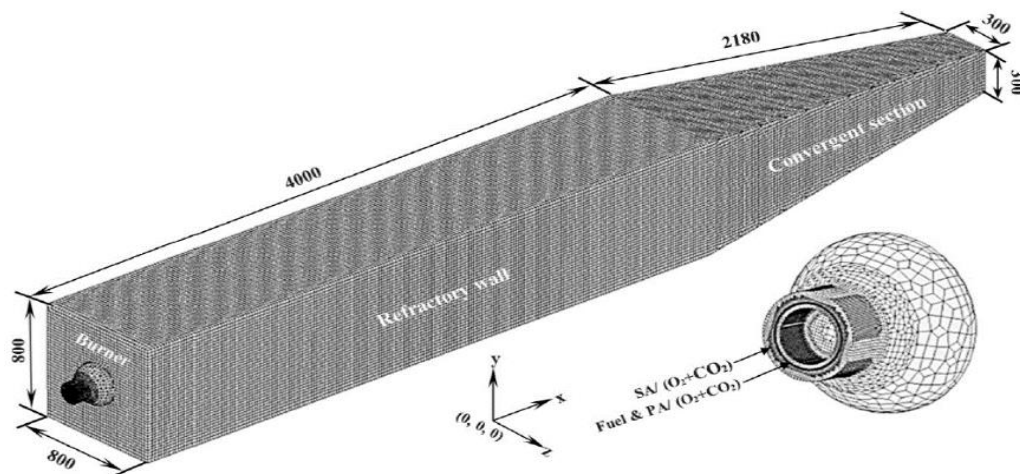
O tamanho das partículas de carvão foi modelado por uma distribuição probabilística desenvolvida por Rosin-Rammler (BROW, 1995) e, de acordo com Smart *et al.* (2010), sua distribuição varia de 75 a 300 µm, sendo que cerca de 77,5% do fluxo total de partículas possuem diâmetro menor de 75 µm, com um fator de dispersão de 5,78. Considerou-se que as partículas sejam esféricas uniformemente distribuídas no orifício de entrada. Na transferência de calor considerou-se as partículas como sendo corpos opacos e negros com emissividade unitária (ANSYS, 2009).

Tabela 5 – Resistências térmicas assumidas para as paredes.

| Local                         | Resistência [m <sup>2</sup> K/W] |
|-------------------------------|----------------------------------|
| Parede Superior               | 0,397                            |
| Parede Inferior               | 0,235                            |
| Paredes Laterais              | 0,109                            |
| Paredes Laterais do Queimador | 0,109                            |
| Parede Final do Queimador     | 0,109                            |

Fonte: Stechly *et al.* (2014)

Figura 3 – Diagrama esquemático da geometria da fornalha.



Fonte: Naser e Bhuiyan (2015)

As condições de contorno na entrada primária e secundária são mostradas na Tabela 6.

Tabela 6 – Condições de contorno na entrada primária e secundária.

| Parâmetros                       | Valor |
|----------------------------------|-------|
| <i>Entrada primária</i>          |       |
| Vazão mássica de oxidante [kg/h] | 110,0 |
| Velocidade Axial [m/s]           | 15    |
| Temperatura [K]                  | 343   |
| Teor O <sub>2</sub> [%]          | 23,15 |
| Vazão de carvão [kg/h]           | 68    |
| <i>Entrada secundária</i>        |       |
| Vazão mássica [kg/h]             | 620,0 |
| Velocidade Axial [m/s]           | 39,76 |
| Velocidade Angular [rad/s]       | 371   |
| Temperatura [K]                  | 543   |
| Teor O <sub>2</sub> [%]          | 23,15 |
| Número de <i>swirl</i>           | 0,6   |

Fonte: adaptado de Naser e Bhuiyan (2015).

#### 4.1 CONFIGURAÇÕES DE MALHA

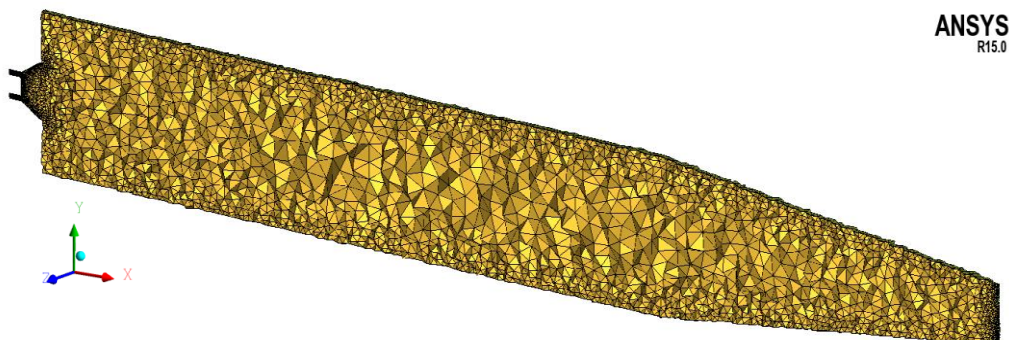
A malha computacional foi gerada no software ICEM CFD, programa integrante do pacote Ansys, realizada com a implementação de volumes tetraédricos e prismáticos, sendo que os prismas foram utilizados somente nas paredes do equipamento. O tipo de malha utilizado foi o Delaunay qual garante refinamentos de malha onde necessário e mantém volumes maiores onde for possível. Além disso, a triangulação de Delaunay otimiza

simultaneamente os seguintes critérios: max-min ângulo (maximização do mínimo ângulo interno dos triângulos); min-max circuncírculo (minimização do máximo circuncírculo das arestas); min-max min-círculo de contenção (minimização do máximo mínimo-círculo de contenção das arestas). Seguindo este padrão, a malha foi gerada em três dimensões, como mostra a Figura 4 em um corte axissimétrico, contando com um número de volumes de controle de aproximadamente  $1 \times 10^6$ . Utilizou-se um maior refinamento destes volumes na região do queimador e na região aonde se desenvolve a chama. Para gerar o refinamento da malha, adicionou-se nas regiões citadas uma *density*, a qual auxilia na criação de volumes de menor tamanho em uma região específica.

#### 4.2 MÉTODO NUMÉRICO COMPUTACIONAL

Um método numérico tem como objetivo a resolução de um sistema de equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita (MALISKA, 2004). Quando a solução analítica não é viável, uma aproximação numérica da equação diferencial pode ser realizada, porém a solução será baseada para um número discreto de pontos, o que acarretará em erros no valor final, assim, quanto maior for o número de pontos, mais preciso é o resultado (não eliminando os erros por completo). Aqui adota-se o método dos volumes finitos de Patankar (1980) para obter as equações aproximadas, o qual satisfaz a conservação das propriedades em nível de volumes elementares

Figura 4 – Malha computacional em corte axissimétrico



#### 4.3 CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

O critério de convergência adotado para a solução das simulações numéricas foi o RMS (*Root Mean Square* – Raiz Quadrática Média) o qual visa obter valores normalizados dos resíduos das equações. Estes resíduos são uma medida da dissimilaridade local de cada equação do volume de controle conservativo. Para as simulações numéricas computacionais, estabeleceu-se o valor de  $10^{-4}$  para todos resíduos, desta forma, buscando-se atingir uma convergência satisfatória.

### 5 RESULTADOS

A Figura 5 mostra as linhas de corrente ao longo da fornalha a partir da entrada primária e secundária de ar (oxidante) e combustível (carvão pulverizado). É possível, através desta figura, observar que o escoamento está se comportando como o esperado, apresentando movimentos rotacionais em espiral, na forma de redemoinhos, aos quais são característicos de escoamentos com *swirl*. Nesta figura a escala representa a velocidade do escoamento. Observa-se que algumas das trajetórias apresentam desaceleração do escoamento, o que ocasiona recirculações.

A Figura 6 mostra a trajetória das partículas de carvão sobre este escoamento a partir da entrada de combustível. Verifica-se que as partículas de carvão com maior velocidade encontram-se na saída do

queimador, região na qual ocorrem as reações de queima. Observa-se, também, que algumas partículas estão desacelerando, assim como acontece com as linhas de corrente mostradas na Figura 5, acompanhando as recirculações. Ao longo da fornalha pode-se notar que as partículas tendem a ir para o fundo da fornalha. Isso se deve ao fato de que as partículas estão sujeitas a ação das forças gravitacionais e não seguem perfeitamente a trajetória do escoamento.

Na Figura 7, a qual mostra a distribuição de velocidades para a componente escalar  $u$ , na direção axial em um plano vertical ao eixo central da fornalha, fica visível, no interior do bocal, uma zona de recirculação.

A Figura 8 mostra o campo de temperaturas no mesmo plano vertical ao eixo central da fornalha. Nota-se que a chama está concentrada na saída do queimador e que a mesma é relativamente curta.

A partir das Figuras 7 e 8 é possível notar que ao longo da fornalha, devido a temperatura e variação da massa específica dos gases de combustão, estes passam a se concentrar na parte superior, desenvolvendo maiores velocidades comparados às partículas sólidas de cinzas que se concentram na parte inferior da fornalha.

A Figura 9 mostra uma comparação dos dados para fluxo de absorção de radiação pelas paredes da fornalha simulada e dos dados experimentais obtidos por Smart *et al.*, (2010).

Figura 5 – Linhas de corrente ao longo da fornalha.

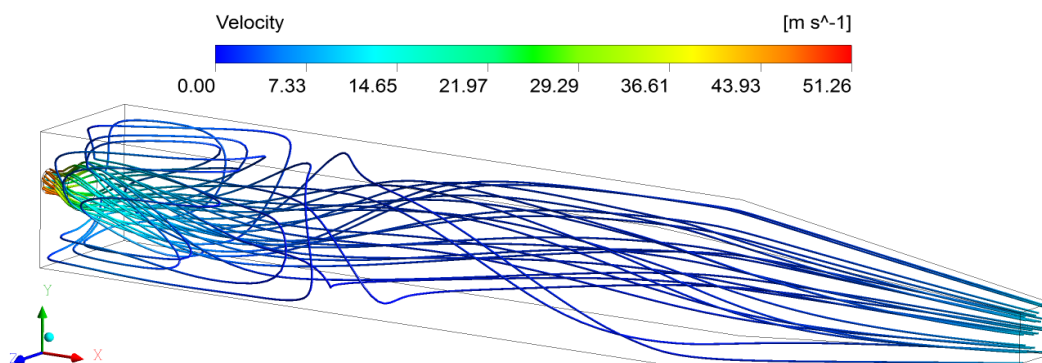


Figura 6 – Linhas de trajetórias de partículas ao longo da fornalha.

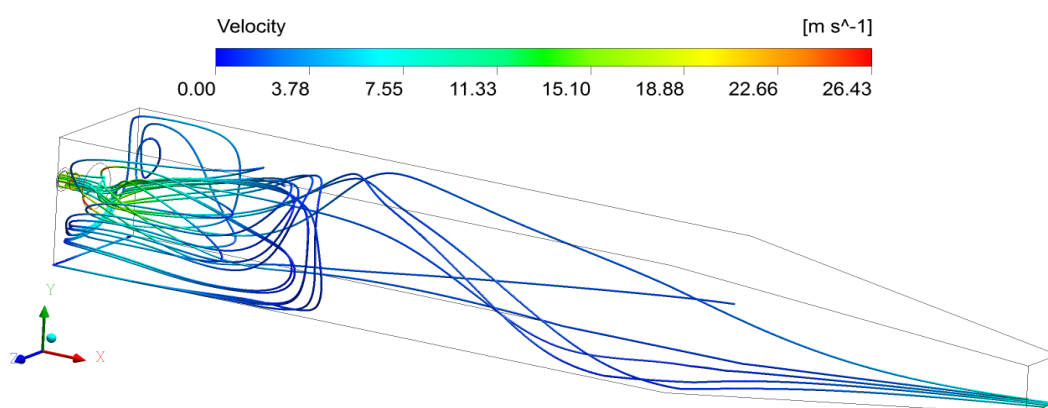


Figura 7 – Campo de velocidade axial em um plano vertical ao eixo central da fornalha.

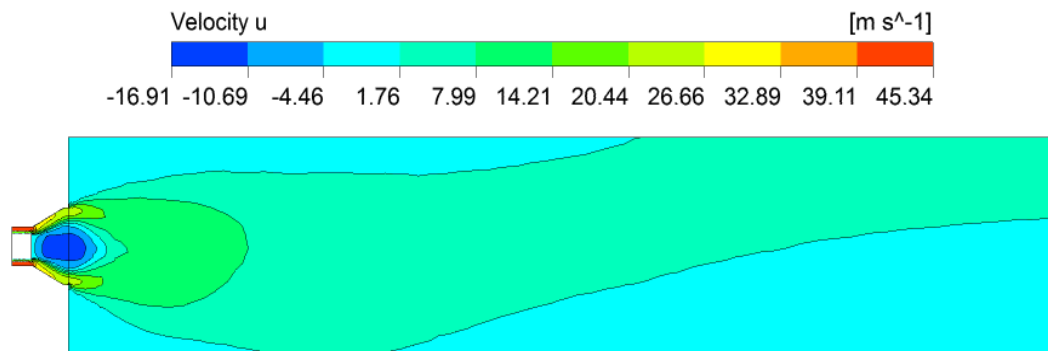


Figura 8 – Campo de temperatura em um plano vertical ao eixo central da fornalha.

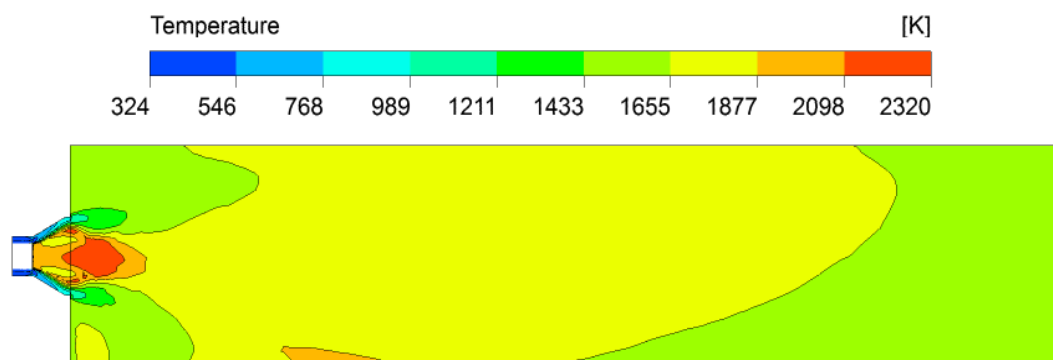
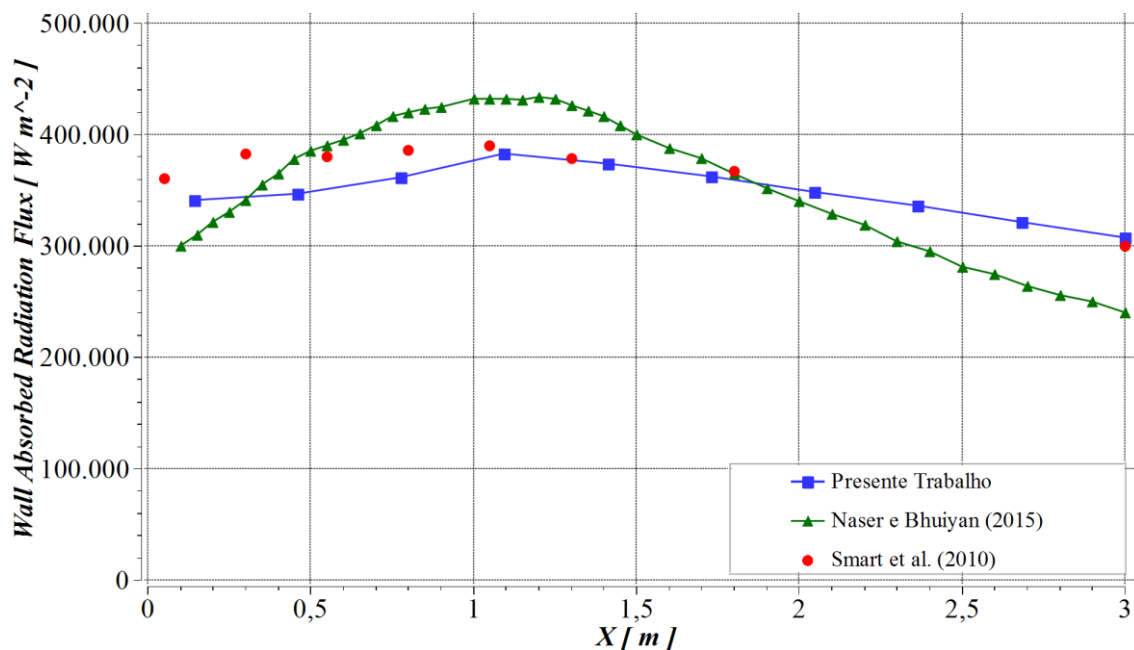


Figura 9 – Comparação dos dados obtidos através da simulação no presente trabalho com os dados experimentais mensurados por Smart *et al.* (2010) e adquiridos por meio de simulação por Naser e Bhuiyan (2015) para o fluxo de absorção de radiação pelas paredes ao longo do eixo longitudinal da fornalha.



A variação no fluxo de calor por radiação nas paredes está ligada às variações de temperatura no interior da fornalha. Uma vez que a radiação é proporcional à quarta potência da temperatura, uma resolução correta do campo de temperaturas é importante na resolução da transferência de calor radiativa.

Na Figura 9 são comparados três casos: os resultados do presente trabalho; os de Naser e Bhuiyan (2015), também obtidos por simulações em CFD; e os experimentais de Smart *et al.* (2010), obtidos a partir das condições reais de operação da fornalha. É possível notar que no presente trabalho conseguiu-se melhor concordância de dados do que no trabalho desenvolvido por Naser e Bhuiyan (2015), quando comparados com os dados experimentais mensurados por Smart *et al.* (2010). Isso mostra que a modelagem numérica utilizada neste estudo foi capaz de descrever mais eficientemente a transferência de calor por radiação nas paredes do caso real de operação, fornecendo uma indicação de melhor precisão do que a modelagem utilizada por Naser e Bhuiyan (2015).

## 6 CONCLUSÕES

Por meio do presente trabalho evidenciou-se que a modelagem numérica desenvolvida pelo LABSIM se mostrou eficiente para descrever o

processo de combustão de carvão, principalmente em relação à transferência de calor por radiação, quando comparado com os dados experimentais de Smart *et al.* (2010) do caso real de operação da fornalha.

## 7 AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) e CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior).

## 8 REFERÊNCIAS

- ANSYS Inc. User's guide - **CFX Solver Theory**, 2009.
- CZERNICHOWSKI-LAURRIOL, I.; EHINGER, A.; THYBAUD, N. CO<sub>2</sub> Capture and Storage in the Sub-surface – A Technological Pathway for Combating Climate Change (2007).
- DORIGON, L. J.; DUCIAK, G.; BRITTES, R.; CASSOL, F.; GALARÇA, M.; FRANÇA, F. H. R. WSGG correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> mixtures. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 64, p. 863-873, 2013.

EATON, A. M.; SMOOT, L. D.; HILL, S. C.; EATOUGH, C. N. Components, formulations, solutions, evaluations, and application of comprehensive combustion models. **Progress in Energy and Comb. Sci.**, v. 25, p. 387-436, 1999.

HOTTEL, H. C.; SAROFIM, A. F. **Radiative Transfer**. McGraw-Hill, 1967.

IPCC Climate Change 2014, **Intergovernmental Panel on Climate Change Forth IPCC**, Assessment Report, 2014.

KUO, K. K. **Principles of Combustion**. 2 ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2005.

LAUNDER, B. E.; SHARMA, B. I. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. **Letters in Heat and Mass Transfer**, v. 19, p. 519-524, 1974.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2ª edição. Florianópolis: LTC, 2004.

NASER, J.; BHUIYAN, A.A. Numerical modelling of oxy fuel combustion, the effect of radiative and convective heat transfer and burnout. **Fuel**, 139:268–84, 2015.

NIKURADSE, J. **Strömungsgesetze in Rauhen Rohren**. Forsch. Arb. Ing. – Ees.. VDI-Forsch 361, 1933.

SILVA, C. V.; INDRUSIAK, M. L. S.; BESKOW, A. B. CFD analysis of the pulverized coal combustion processes in a 160 MWe tangentially-fired-boiler of a thermal power plant. **Journal of the Brazilian Soc. Mechanical Sciences. & Eng.**, v. XXXII, n. 4, p. 328-336, 2010.

SILVA, C.V.; FRANÇA, F. H. R.; VIELMO, H. A. Analysis of the Turbulent, Non-Premixed Combustion of Natural Gas in a Cylindrical Chamber With and Without Thermal Radiation. **Combust. Sci. and Tech.**, v. 179, p. 1605-1630, 2007.

SMART, J.P.; PATEL, R.; RILEY, G.S. Oxy-fuel combustion of coal and biomass, the effect on radiative and convective heat transfer and burnout. **Combustion and Flame**, 157(12):2230–40, 2010.

STECHLY, K.S.; WECEL, G.; INGHAM, D. CFD modelling of air and oxy-coal combustion. **Int J Numer Meth Heat Fluid Flow**, 24(4):825–44, 2014.

URNS, S. T. **An introduction to combustion – Concepts and Applications**. 2nd ed., New York, McGraw-Hill, 2000.

UBHAYAKAR, S. W.; STICKLER, D. B.; ROSENBERG J. R.; GANNON, R. E. Rapid Devolatilization of Pulverized Coal in Hot Combustion Gases. **Proceedings of the Combustion Institute**, p. 427-436, 1976.

VELICKO, A. J.; DA SILVA, C. V.; BESKOW, A.; INDRUSIAK, M. L. S. Análise em CFD do Processo de Co-Combustão de Carvão Mineral com Biomassa Lenhosa: Influência da Umidade. **“Perspectiva”**, v.39, 2015.

XIANCHUN, L.; HUI, S.; QI, W.; CHATPHOL, M.; TERRY, W.; JIANGLONG, Y. Experimental study on drying and moisture re-adsorption kinetics of an Indonesian low rank coal. **Journal of Environmental Sciences Supplement**, v. 5, p. 127-130, 2009.