

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

PROPOSIÇÃO DE UM METAMODELO PARA A REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO  
DE COMBUSTÃO DE CARVÃO EM UM TUBO DE QUEDA LIVRE BASEADO EM  
ANÁLISE NUMÉRICA

por

Diogo Angelo Stradioto

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Setembro de 2019.

PROPOSIÇÃO DE UM METAMODELO PARA A REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO  
DE COMBUSTÃO DE CARVÃO EM UM TUBO DE QUEDA LIVRE BASEADO EM  
ANÁLISE NUMÉRICA

por

Diogo Angelo Stradioto  
Mestre em Engenharia

Tese de doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de:

Doutor em Engenharia

Área de concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Paulo Smith Schneider

Co-orientador: Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva

Aprovada por:

Prof.<sup>a</sup> Dra. Paula Cristina Garcia Manoel Crnkovic.....USP

Prof. Dr. Rodrigo Corrêa da Silva.....UTFP

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira.....PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno.....PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 27 de Setembro de 2019.

Dedico este trabalho a minha esposa e filha, Josiéli e Paola

Aos meus pais, Neiva e Osvaldo

Ao meu irmão, Marlon e sua família, Angélica e Enzo.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço em primeiro lugar a minha família, a qual concedeu apoio incondicional em toda minha jornada de vida, a minha esposa, Josiéli, pela compreensão, dedicação, auxílio e paciência. Agradecimento especial a minha filha, Paola, a qual me deu muita inspiração, resiliência e força para continuar, mesmo com todas as adversidades. Também foram fundamentais em outro ensinamento primordial deste trabalho e que levo para a vida, que é saber administrar o tempo entre família, trabalho, lazer e estudos, saber conciliar tudo isso, foi o maior desafio superado.

Agradeço a Deus acima de tudo, por ter me dado condições e capacidade para a realização desse trabalho.

Um agradecimento especial aos professores e amigos Paulo Smith Schneider e Cristiano Vitorino da Silva, os quais foram fundamentais para a conclusão deste trabalho, pois certamente sem o empenho e confiança destes depositada em mim, este trabalho não teria sido possível.

Aos professores da comissão de avaliação, os quais se disponibilizaram a contribuir com este trabalho e com minha formação.

A EDP do Brasil pela possibilidade de compartilhar o trabalho na empresa e os estudos. Também a minha equipe e colegas de trabalho pelo incentivo e auxílio durante esta jornada.

Aos colegas do LETA pela ajuda, troca de conhecimento e conselhos.

A todos aqueles que de alguma forma, colaboraram para que este trabalho se realizasse.

Muito obrigado a todos!

## RESUMO

O presente trabalho apresenta uma metodologia de avaliação dos processos de combustão em um *Drop Tube Furnace*– DTF. O processo de combustão é modelado em um *software* comercial de Mecânica de Fluidos Computacional - CFD e posteriormente ampliado com o auxílio da metodologia estatística de Projeto de Experimentos – DoE. As simulações são baseadas em parâmetros de operação reais de um DTF associado a dados experimentais disponíveis na literatura, considerando a reação de combustão de carvão. O modelo CFD permite observar o perfil de escoamento, temperatura das partículas de carvão, etapas de devolatilização e oxidação do carbono residual, composição dos gases de combustão, taxa de queima de partículas (*burnout*), além dos efeitos da fuligem e da radiação térmica no processo. Os resultados do CFD mostram o efeito da queima e da fuligem na temperatura da chama, as taxas de *burnout* de acordo com o tempo de permanência e a temperatura no reator, e quantificam as emissões de CO e NO<sub>x</sub>. Os desvios médios entre os resultados calculados e os dados experimentais da literatura para temperatura e *burnout* são de 1,65 % e 3,2 %, respectivamente, obtidos com o modelo em CFD, e de 6,02 % e 3,5 % para o metamodelo. DoE é aplicado aos fatores de controle mais relevantes para as faixas de operação, como: excesso de ar (120 à 585 %), umidade (1,5 à 12 %) e teor de cinzas (1,5 à 10 %) do combustível. Os fatores de resposta observados são temperatura dos gases, *burnout*, carbono residual (*Char*), fração de cinza residual (*Ash Residual*), NO<sub>x</sub> e fuligem (*Soot*). O DTF é dividido em 7 volumes adjacentes para os quais são construídos metamodelos algébricos que permitem o cálculo rápido da fração mássica de cinza na partícula, carbono residual, fuligem e NO<sub>x</sub>. O desvio médio entre os resultados do metamodelo e dos dados experimentais é de 6,02 % para a temperatura dos gases, 3,58 % para o teor de cinzas residuais e 0,21% para a fuligem. Desvios maiores são encontrados nas regiões intermediárias do DTF. As duas abordagens numéricas são capazes de caracterizar o processo de combustão com uma boa concordância em relação aos dados experimentais usados como base.

**Palavras-chave:** Combustão de carvão; *Drop Tube Furnace*; DTF; Combustão com CFD; Combustão com DoE; Metamodelo de combustão.

## ABSTRACT

The present work presents a methodology for the evaluation of combustion processes in a Drop Tube Furnace - DTF. The combustion process is modeled by a commercial Computational Fluid Mechanics (CFD) software and the study is further expanded with the aid of the Experiment Design statistical methodology (DoE). Simulations are based on actual operating parameters of a DTF associated with experimental data available in the literature, considering the coal combustion reaction. The CFD model allows to observe the flow profile, carbon and biomass particle temperature, residual carbon devolatilization and oxidation steps, flue gas composition, burnout rate, as well as the effects of soot and process thermal radiation. CFD results show the effect of burning and soot on flame temperature, burnout rates according to residence time and reactor temperature, and quantify CO and NO<sub>x</sub> emissions. The average deviations of the results for temperature and burnout to the calculated values and experimental literature data for the same reactor are 1.65% and 3.2%, respectively, obtained with the CFD model, and 6.02% and 3.5% for the metamodel. DoE methodology is applied to control factors within the operating ranges of excess air (120 to 585%), fuel humidity (1.5 to 12%) and ash content (1.5 to 10%), identified as the most relevant to the combustion process. The observed response factors are gas temperature, burnout, residual carbon (Char), residual ash fraction (Residual Ash), NO<sub>x</sub> and soot, displayed as response surfaces. DTF is divided into 7 adjoining volumes for which algebraic metamodels are constructed allowing for the quick prediction of ash mass fraction, residual carbon, soot and NO<sub>x</sub>. Metamodel to experimental data average deviation is 6.02% for gas temperature, 3.58% for particulate residual ash and 0.21% for soot. Larger deviations are found in the intermediate regions of the DTF. Both numerical approaches are able to characterize the combustion process with good agreement.

**Key-Words:** Coal combustion; Drop Tube Furnace; DTF; CFD combustion; DoE combustion; Combustion metamodel.

# ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
1.1	O cenário atual do carvão.....	3
1.2	Matriz energética do Brasil .....	6
1.3	Revisão bibliográfica .....	8
1.3.1	Emprego do CFD na combustão de carvão .....	8
1.3.2	Estudos com DTF .....	12
1.4	Objetivos do trabalho .....	14
1.5	Contribuições da pesquisa.....	15
1.6	Organização da tese.....	15
<b>2</b>	<b>Modelo MATEMÁTICO .....</b>	<b>16</b>
2.1	Conservação da quantidade de movimento.....	17
2.2	Conservação de energia.....	21
2.3	Combustão .....	22
2.3.1	Modelagem da combustão .....	22
2.3.2	Eddy Dissipation Model .....	22
2.3.3	Finite rate chemistry model (Arrhenius).....	23
2.3.4	Modelo de reações químicas E–A (Eddy-Breakup-Arrhenius) .....	24
2.3.5	Modelo de reações NOx .....	24
2.4	Combustão de combustíveis sólidos .....	25
2.4.1	Modelo de combustão da partícula .....	28
2.4.2	Trajetória da partícula.....	29
2.4.3	Aquecimento e resfriamento inerte da partícula .....	30
2.4.4	Modelo de secagem da partícula.....	30
2.4.5	Modelo de devolatilização da partícula .....	31
2.4.6	Modelo de oxidação do carbono residual .....	33
2.4.7	Modelo para cálculo do diâmetro da partícula .....	34
2.5	Modelagem da nucleação e combustão de fuligem.....	35
2.5.1	Formação de fuligem .....	36
2.5.2	Combustão de fuligem .....	38
2.6	Modelagem da radiação térmica .....	38

2.6.1	Equação da transferência radiativa - ETR .....	39
2.6.2	DTRM – Discrete Transfer Radiation Model .....	40
2.6.3	Modelo de Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza - WSGG .....	41
2.6.4	Modelo WSGG - Coeficientes de Dorigon.....	42
2.6.5	Modelo de gás cinza - GC .....	43
2.6.6	Radiação devido a fuligem .....	43
2.7	Burnout.....	45
2.8	Limitações do modelo .....	45
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA .....</b>	<b>47</b>
3.1	Características do Drop Tube Furnace (DTF).....	47
3.1.1	Geometria .....	49
3.2	Método numérico computacional.....	50
3.3	Critério de convergência .....	52
3.4	Domínio de investigação e malha computacional.....	52
3.4.1	Estudo de qualidade da malha .....	53
3.5	Dados de entrada e combustível.....	57
3.6	Escoamento no reator.....	60
3.7	Comparação com dados experimentais.....	61
3.8	Modelo computacional.....	64
3.8.1	Modelo de turbulência .....	64
3.8.2	Efeito da fuligem .....	65
3.8.3	Modelos numéricos adotados .....	66
<b>4</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>68</b>
4.1	Combustão de carvão mineral.....	68
4.1.1	Tamanho e temperatura da partícula.....	68
4.1.2	Liberação dos voláteis .....	72
4.1.3	Oxidação do carbono residual e fuligem .....	73
4.1.4	Temperatura dos gases no interior do reator e burnout .....	75
4.1.5	Perfil de O <sub>2</sub> no reator .....	77
4.2	Análise das espécies químicas na composição dos gases de combustão ao longo do DTF	
	79	
<b>5</b>	<b>METAMODELO PARA O DTF.....</b>	<b>83</b>

5.1	Aplicação da metodologia DoE para determinar as simulações e cruzamento das variáveis.....	84
5.2	Saída do DoE .....	86
5.3	Resultados obtidos com as equações do metamodelo.....	94
5.4	Resumo do método desenvolvido para obter o metamodelo .....	101
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES .....</b>	<b>105</b>
6.1	Sugestões para próximos trabalhos .....	108
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>109</b>
	<b>APENDICE A A Figura 8.1 apresenta os campos das espécies ao longo do DTF.....</b>	<b>119</b>
	<b>ANEXO I Método numérico computacional.....</b>	<b>120</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Reservas de carvão no mundo em 2007 [ANEEL, 2016].....	4
Figura 1.2	Tipos de carvão e sua utilização [ANEEL, 2016].....	4
Figura 1.3	Fontes de energia primária no Brasil [MME, 2018].....	6
Figura 1.4	Megatendências do setor de energia.....	7
Figura 2.1	Principais modelos utilizados.....	17
Figura 2.2	Representação dos estágios de combustão dos combustíveis sólidos [Adaptado de Karlstrom, 2017].....	26
Figura 2.3	Temperatura na superfície e no centro das partículas de carvão, quando submetidas a uma temperatura de 1.000 °C [Adaptado de Karlstrom, 2017].....	27
Figura 2.4	Ilustração da partícula de carvão durante a desvolatilização [Adaptado de Conrado et al., 2015].....	28
Figura 2.5	Modelo de devolatilização do carvão com secagem [Ubhayakar et al., 1976 e Xianchun et al., 2009].....	31
Figura 2.6	Esquema de reações químicas do carvão bruto [Ubhayakar et al., 1976].....	32
Figura 2.7	Comportamento da absorvância em função do comprimento de onda no dióxido de carbono [Siegel e Howell, 2002].....	41
Figura 3.1	<i>Drop Tube Furnace</i> [Adaptado de Wang et al., 2014].....	49
Figura 3.2	Arranjo esquemático dos modelos utilizados.....	51
Figura 3.3	Malha computacional gerada no <i>software</i> ICEM CFD® em corte longitudinal, mostrando a discretização dos elementos volumétricos na região de entrada.....	53
Figura 3.4	Vista isométrica no <i>software</i> Ansys CFX.....	53
Figura 3.5	Gráfico do teste de independência de malha.....	56
Figura 3.6	Trajetória das partículas em função da velocidade no interior do reator.....	60
Figura 3.7	Número de Reynolds e temperatura dos gases no reator.....	61
Figura 3.8	Campo de temperatura na linha de centro do reator para carvão.....	62
Figura 3.9	Taxas de <i>burnout</i> na linha de centro do reator para carvão.....	63
Figura 3.10	Comparativo dos modelos de turbulência. Resultados para temperatura dos gases.....	64
Figura 3.11	Efeito da fuligem na temperatura.....	66
Figura 4.1	Evolução da partícula de combustível no interior do reator e formação de carbono residual.....	70

Figura 4.2	Velocidade e tempo de residência das partículas de combustível no reator.....	71
Figura 4.3	Temperatura na superfície da partícula de carvão e temperatura dos gases durante percurso no reator.....	72
Figura 4.4	Início do processo de devolatilização versus temperatura na face da partícula.	73
Figura 4.5	Oxidação do carbono residual e formação de fuligem ( <i>Soot</i> ).....	74
Figura 4.6	Formação de espécies químicas durante as etapas de devolatilização, oxidação do carbono residual, formação de Fuligem ( <i>Soot</i> ) e NO <sub>x</sub> .....	77
Figura 4.7	Fração mássica média de O <sub>2</sub> nos gases e na linha de centro do reator.....	78
Figura 4.8	Vistas do plano transversal no centro do DTF, representando Campos de Temperatura, CH <sub>4</sub> , CO, CO <sub>2</sub> , NO e Fuligem ( <i>Soot</i> ).....	80
Figura 4.9	Vistas do plano transversal no centro do DTF, representando Campos de H <sub>2</sub> , HCN, HCO, H <sub>2</sub> O e O <sub>2</sub> .....	81
Figura 4.10	Vistas do plano transversal no centro do DTF, representando os principais produtos que se formam no reator.....	82
Figura 5.1	Representação dos fatores de controle do planejamento experimental.....	85
Figura 5.2	DTF Zonas de análise e coleta de dados e geração das equações do metamodelo.....	87
Figura 5.3	Variáveis de maior relevância para os resultados de temperatura média e fuligem na saída do reator.....	88
Figura 5.4	Método de Superfície de Resposta (RSM) para os resultados de temperatura, variando vazão de ar, umidade e cinza do combustível.....	89
Figura 5.5	Fluxo do processo de cálculo com as equações do metamodelo.....	94
Figura 5.6	Temperatura na linha de centro do reator, obtida pelo dado experimental, simulação numérica no CFX e o metamodelo.....	95
Figura 5.7	Taxa de <i>carbono residual</i> na linha de centro do reator, obtida pela simulação numérica no CFX e o metamodelo.....	96
Figura 5.8	(a) Fração mássica de cinza na partícula (c) Taxas de <i>burnout</i> na linha de centro do reator, obtida pelo dado experimental, simulação numérica no CFX e o metamodelo.....	97
Figura 5.9	(a) Geração de fuligem durante o processo de combustão do carvão, calculado com modelos numéricos no CFX e o metamodelo, (b) Erro em relação ao dado numérico do CFX.....	98
Figura 5.10	Comparação dos resultados obtidos com os métodos numéricos CFD e o metamodelo para temperatura e fuligem – Experimento 09.....	98

Figura 5.11	Comparação dos resultados obtidos com os métodos numéricos CFD e o metamodelo para temperatura e fuligem – Experimentos 07, 14, 15 e 25.....	99
Figura 5.12	Comparação dos resultados obtidos com os métodos numéricos CFD e o metamodelo para temperatura e fuligem – experimentos 05, 20, 21 e 27.....	100
Figura 5.13	Fluxograma desenvolvido para simplificar o modelo numérico.....	101
Figura A.1	A tarefa do método numérico, [Maliska, 2004].....	121
Figura A.2	Presença de difusão numérica no uso do esquema <i>up-wind</i> na aproximação da advecção [Maliska, 2004].....	122
Figura A.3	Volume elementar tridimensional. [Maliska, 2004].....	123
Figura A.4	Fluxograma de resolução adotado pelo Ansys CFX. [Adaptado de ANSYS, 2013].....	128
Figura A.5	Variação dos volumes de controle da malha durante a solução de um problema no Ansys CFX. [Adaptado de ANSYS, 2013].....	129

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1	Termelétricas a carvão em operação no Brasil [ANEEL, 2016].....	5
Tabela 2.1	Coefficientes WSGG de [Dorigon et al., 2013].....	42
Tabela 2.2	Coefficientes WSGG para fuligem [Cassol et al., 2014].....	44
Tabela 3.1	Temperatura e frações mássicas médias para O <sub>2</sub> e CO <sub>2</sub> na saída do reator.....	54
Tabela 3.2	Índice de convergência de malha para as variáveis utilizadas.....	56
Tabela 3.3	Composição elementar e imediata do carvão betuminoso.....	58
Tabela 3.4	Dados de entrada e condições de contorno no reator.....	59
Tabela 3.5	Constantes cinéticas para as reações envolvendo o carvão.....	59
Tabela 3.6	Diferença dos modelos encontrados na literatura e os adotados neste trabalho.....	66
Tabela 4.1	Dados de entrada no reator.....	68
Tabela 4.2	Características da partícula de carvão.....	69
Tabela 4.3	Propriedades médias dos gases de combustão na seção de saída do DTF.....	79
Tabela 5.1	Dados de entrada para a aplicação no DoE.....	83
Tabela 5.2	Simulações e variáveis a serem aplicadas de acordo com os resultados obtidos com a metodologia DoE.....	85
Tabela 5.3	Equações do metamodelo para temperatura e NO <sub>x</sub> na saída do reator.....	90
Tabela 5.4	Equações do metamodelo para carbono residual ( <i>Char</i> ).....	91
Tabela 5.5	Equações do metamodelo para fração mássica de cinza na partícula.....	92
Tabela 5.6	Equações do metamodelo para fuligem ( <i>Soot</i> ).....	93

## LISTA DE SIMBOLOS, SIGLAS E ABREVIATURAS

### Símbolos Romanos

$A$	Fator pré-exponencial – Equação Arrhenius	[kg <sup>-2</sup> m <sup>6</sup> s <sup>-1</sup> ]
$A'$	1° Coeficiente do modelo <i>Eddy Dissipation</i>	[-]
$a$	Primeira constante da equação da formação da partícula de fuligem	[-]
$A_c$	Coeficiente pré-exponencial – oxidação <i>char</i>	[kg.m <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$a_{g,n}$	Coeficiente de ponderação – Fase gás	[-]
$a_j$	Coeficiente de ponderação – modelo WSGG	[-]
$A_k$	Fator pré-exponencial da equação de Arrhenius	[mol <sup>-0,75</sup> cm <sup>2,25</sup> /s]
$a_{n,m}$	Coeficiente de ponderação - composição	[-]
$a_{s,m}$	Coeficiente de ponderação – Fuligem	[-]
$a_0$	Constante da equação de taxa de formação espontânea de fuligem	[-]
$b$	Segunda constante da equação da formação da partícula de fuligem	[-]
$B'$	2° Coeficiente do modelo <i>Eddy Dissipation</i>	[-]
$b_{j,k}$	Constantes empíricas – Modelo WSGG	[-]
$B_k$	Taxa de reação - sentido reversível – <i>Finite Rate Chemistry</i>	[-]
$B_p^T$	Método Numérico - Termo fonte	[-]
$C_{ash}$	Fração mássica de cinzas	[kg/kg]
$C_{ch}$	Fração mássica de char	[kg/kg]
$c_f$	Concentração específica de combustível	[kg/m <sup>3</sup> ]
$C_{O_2}$	Fração mássica de O <sub>2</sub>	[kg/kg]
$C_p$	Calor específico	[kJ/kg.K]
$C_{p_i}$	Calor específico da espécie $i$	[kJ/kg.K]
$\bar{C}_s$	Concentração média local de fuligem	[kg/m <sup>3</sup> ]
$C_\mu$	Constante empírica do modelo de turbulência	[-]
$C_o$	Fração mássica de carvão bruto	[kg/kg]
$c_1$	Constante do metano para modelo WD2	[-]
$c_2$	Constante do monóxido de carbono para modelo WD2	[-]
$D$	Diâmetro da partícula sólida	[m]

$D_i$	Difusividade cinemática	[m <sup>2</sup> /s]
$D_{ref}$	Difusividade dinâmica	[m <sup>2</sup> /s]
$E$	Energia de ativação de taxa de formação espontânea de fuligem	[kcal/mol]
$E_k$	Energia de ativação – <i>Finite Rate Chemistry</i>	[kcal/mol]
$f$	Coeficiente linear de ramificação	[-]
$F_k$	Taxa de reação - sentido normal – <i>Finite Rate Chemistry</i>	[-]
$g$	Coeficiente de terminação linear	[-]
$g_0$	Coeficiente de terminação linear na partícula de fuligem	[-]
$\tilde{h}$	Entalpia média	[kJ/kg]
$h_i^0$	Entalpia de formação	[kJ/kg]
$I$	Concentração molar	[mol/m <sup>3</sup> ]
$I_b$	Intensidade de radiação emitida pelo corpo negro	[W/(m <sup>2</sup> .sr.μm)]
$I_\nu$	Intensidade da radiação (função da frequência)	[W/(m <sup>2</sup> .sr.μm)]
$I_{\lambda,e}$	Intensidade espectral da radiação	[W/(m <sup>2</sup> .sr.μm)]
$\tilde{k}$	Energia cinética turbulenta	[J/kg]
$K_a$	Coeficiente de absorção – RTE simplificada	[-]
$K_{av}$	Coeficiente de absorção	[-]
$k_c$	Taxa de reação do carbono residual	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$k_d$	Coeficiente da taxa de difusão de oxigênio	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$k_{g,n}$	Coeficiente de absorção – fase gás	[-]
$K_j$	Coeficiente de absorção – modelo WSGG	[-]
$k_{n,m}$	Coeficiente de absorção - composição	[-]
$k_{s,m}$	Coeficiente de absorção - fuligem	[-]
$K_{sv}$	Coeficiente de espalhamento	[-]
$k_1$	Constantes empíricas de velocidade da reação 1	[kg/s]
$k_2$	Constantes empíricas de velocidade da reação 2	[kg/s]
$k-\varepsilon$	Modelo de turbulência $k-\varepsilon$	[-]
$\tilde{k}-\tilde{\omega}$	Modelo de turbulência $k-\omega$	[-]
$\dot{m}_i$	Vazão mássica da espécie $i$	[kg/s]
$\overline{MM}$	Massa da mistura molecular	[kg/kmol]
$m_p$	Fração mássica - partícula de fuligem	[kg/kg]
$n$	Concentração de núcleos de fuligem	[parte/m <sup>3</sup> ]

$n_0$	Taxa de formação espontânea dos núcleos de fuligem	[-]
$N$	Concentração de partículas de fuligem	[parte/m <sup>3</sup> ]
$N_G$	Número total de gases – modelo WSGG	[-]
$N_g$	Número de gases – fase gás - WSGG	[-]
$N_s$	Número de gases – fuligem - WSGG	[-]
$P$	Pressão da câmara de combustão	[Pa]
$p$	Iterações – modelo <i>Eddy Dissipation</i>	[-]
$P_A$	Pressão atmosférica	[Pa]
$p^*$	Pressão modificada	[Pa]
$\bar{p}$	Pressão média da mistura	[Pa]
$p_g$	Pressão parcial do oxigênio nos gases	[Pa]
$\tilde{P}_k$	Termo fonte energia cinética turbulenta	[-]
$Pr_t$	Número de Prandtl turbulento	[-]
$p_s$	Pressão parcial na superfície da partícula	[Pa]
$Q_i$	Energia térmica total da espécie $i$	MW
$R$	Taxa de reação (Equação de Arrhenius)	[-]
$R_{C0}$	Taxa da reação de secagem da partícula de carvão	[-]
$R_{C1}$	Taxa da 1ª reação de desvolatilização do carvão	[-]
$R_{C2}$	Taxa da 2ª reação de desvolatilização do carvão	[-]
$\bar{R}_i$	Taxa média de formação ou destruição da $\alpha$ -ésima espécie química	[-]
$R_k$	Taxa de progresso	[-]
$r''_{kl}$	Ordem de reação do componente I	[-]
$R_p$	Raio médio da partícula	[m]
$r_s$	Razão estequiométrica de oxigênio	[-]
$R_{s,f}$	Reação de formação – partícula de fuligem	[-]
$\mathfrak{R}$	Constante universal dos gases	[J/mol.K]
$S$	Percurso	[m]
$\dot{S}$	Termo fonte - RTE	[-]
$S^\emptyset$	Termo fonte da propriedade $\emptyset$	[-]
$S''$	Termo fonte – equação transferência radiativa	[W/m <sup>3</sup> ]
$Sc_t$	Número de Schmidt turbulento	[-]
$S_i$	Termo fonte – conservação de massa	[kg/s.m <sup>3</sup> ]
$\tilde{S}_{nuclei,f}$	Termo fonte - formação dos núcleos de fuligem	[parte/m <sup>3</sup> /s]
$\tilde{S}_{nuclei,c}$	Termo fonte – oxidação dos núcleos de fuligem	[parte/m <sup>3</sup> /s]

$\tilde{S}_{soot,f}$	Termo fonte - formação das partículas de fuligem	[parte/m <sup>3</sup> /s]
$\tilde{S}_{soot,c}$	Termo fonte - oxidação das partículas de fuligem	[parte/m <sup>3</sup> /s]
$\bar{S}_{rad}$	Termo fonte - energia térmica da transferência radiativa	[W/m <sup>3</sup> ]
$\bar{S}_{rea}$	Termo fonte - energia térmica da reação química	[W/m <sup>3</sup> ]
$\bar{S}_T$	Termo fonte - sumidouro	[W/m <sup>3</sup> ]
$\bar{S}_U$	Termo fonte - empuxo e força de arrasto do transporte de partículas	[W/m <sup>3</sup> ]
$t$	Tempo	[s]
$T$	Temperatura	[K]
$\tilde{T}$	Temperatura média da mistura	[K]
$T_{ar1}$	Temperatura do ar primário	[K]
$T_c$	Temperatura do carvão residual	[K]
$T_p$	Temperatura da partícula	[K]
$T_g$	Temperatura média do campo gasoso	[K]
$\tilde{T}_{ref,i}$	Temperatura de referência das espécies químicas	[K]
$\tilde{U}_{ij}$	Velocidade média	[m/s]
$u, v, w,$	Componentes do vetor velocidade	[m/s]
$V$	Compostos voláteis	[kg]
$x_j$	Comprimento	[m]
$X_N$	Concentração específica dos núcleos de fuligem	[mol/kg]
$Y_i$	Fração mássica da espécie $\alpha$	[kg/kg]
$\tilde{Y}_i$	Média da fração mássica da $\alpha$ -espécies química da mistura	[-]
$\tilde{Y}_S$	Fração mássica de partículas de fuligem	[kg/kg]
$Y_1$	Rendimento da primeira reação de devolatilização	[-]
$Y_2$	Rendimento da segunda reação de devolatilização	[-]
$W_I$	Massa molar do componente I	[g/mol]

## Símbolos Gregos

$\alpha$	Constante empírica do modelo de turbulência	[-]
$\alpha_1$	Expoente de ajuste	[-]
$\beta$	Constante empírica do modelo de turbulência	[-]
$\beta'$	Constante empírica do modelo de turbulência	[-]
$\beta_k$	Expoente da temperatura	[-]
$\delta_{ij}$	Função delta de Kronecker	[-]
$\varepsilon$	Dissipação turbulenta – modelo <i>Eddy Dissipation</i>	[m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup> ]
$\varepsilon_g$	Emitância direcional	[-]
$\varepsilon_W$	Emissividade total do gás	[-]
$\theta$	Ângulo de incidência da radiação	[rad]
$\lambda$	Comprimento de onda	[m]
$\mu$	Viscosidade dinâmica	[Ns/m <sup>2</sup> ]
$\bar{\mu}$	Viscosidade dinâmica média	[Ns/m <sup>2</sup> ]
$\mu_{eff}$	Viscosidade efetiva	[Ns/m <sup>2</sup> ]
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta	[Ns/m <sup>2</sup> ]
$\nu$	Comprimento de onda	[m]
$\nu'_{kl}$	Coefficiente estequiométrico	[-]
$\bar{\rho}$	Massa específica de média	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho$	Massa específica	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma$	Coefficiente de Stefan-Boltzmann	[W/m <sup>2</sup> K <sup>4</sup> ]
$\sigma_k$	Constante empírica do modelo de turbulência	[-]
$\sigma_\omega$	Constante empírica do modelo de turbulência	[-]
$\Gamma^\emptyset$	Coefficiente de transporte	[m/s <sup>2</sup> ]
$\phi$	Ângulo de incidência da radiação	[rad]
$\emptyset$	Propriedade qualquer transportada	[-]
$\Phi$	Função de fase - espalhamento	[-]
$\omega$	Frequência turbulenta	[J/kgm <sup>2</sup> ]
$\Omega$	Ângulo sólido	[rad]
$\vec{\nabla}$	Divergente	[-]
$\vec{\nabla}$	Gradiente	[-]

## Sub-índices

<i>ar</i>	Ar
<i>Ash</i>	Cinzas
<i>coal</i>	Referente ao carvão
<i>g</i>	Gás de combustão
<i>H<sub>2</sub>O</i>	Vapor d'água
<i>α</i>	Espécie química $\alpha$
<i>r</i>	Vetor direcional
<i>s</i>	Vetor direcional
<i>T</i>	Turbulento

## Siglas

ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
CCD	Dispositivo de carga acoplada ( <i>Charge-Coupled Device</i> )
CFD	Dinâmica dos fluidos computacionais ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> )
Char	Carbono residual
CH <sub>4</sub>	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	Acetileno
DTRM	Modelo de ordenadas discretas ( <i>Discret Transfer Radiation Model</i> )
EDC	<i>Eddy Dissipation Concept</i>
EDM	<i>Eddy Dissipation Model</i>
FRC	<i>Finite Rate Chemistry Model</i>
H	Hidrogênio
H <sub>2</sub>	Gás hidrogênio
H <sub>2</sub> O	Água
HCN	Ácido cianídrico
HCO	Aldeído
ICEM	Software de geração de malha em CFD
LBL	Integração linha-por-linha ( <i>line-by-line Integration</i> )
N	Nitrogênio
N <sub>2</sub>	Gás nitrogênio

NO	Monóxido de nitrogênio
NO <sub>x</sub>	Óxidos de nitrogênio
MVF	Método dos volumes finitos
O	Oxigênio
O <sub>2</sub>	Gás oxigênio
RTE	Equação de transferência radiativa ( <i>Radiative Transfer Equation</i> )
TRI	Interações radiação-turbulência ( <i>Turbulence-Radiation Interactions</i> )
SIMPLE	Método das equações acopladas de forma semi implícitas ( <i>Semi Implicit Linked Equations</i> )
WD2	Modelo Westbrook e Dryer de dois passos
WSGG	Soma ponderada de gases cinza ( <i>Weighted Sum of Gray Gases</i> )

## 1 INTRODUÇÃO

O uso de fontes renováveis de energia vem ganhando grande destaque como forma de redução do uso de combustíveis fósseis e atenuar as emissões atmosféricas.

Considerando que o carvão seja um recurso energético abundante e que o mesmo garante menores preços para a eletricidade, se comparado com outras fontes térmicas, como óleo, gás natural, nuclear e algumas renováveis, como solar e geotérmica e ainda, por se tratar de uma fonte importante para a geração firme de energia no mundo, garantindo o abastecimento de energia quando as fontes renováveis passam por intermitências cíclicas. Pela ótica da sustentabilidade, as emissões de gases de efeito estufa são maiores do que a de outros combustíveis fósseis, como derivados de petróleo e gás natural e, mesmo com todos os esforços para redução destas emissões, sua combustão continuará representando parte significativa das emissões de CO<sub>2</sub> nas próximas décadas.

Pesquisas recentes comprovam que o aquecimento global está em curso IPCC (2014) e, fica evidente que a situação é muito crítica, através de observações como, o aumento na temperatura média global do ar e dos oceanos, derretimento generalizado de neve e gelo e aumento do nível médio dos oceanos. Esse mesmo relatório do 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 entre 10 e 20 cm. Com base na avaliação de vários dados disponíveis na literatura, 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 responsável é o dióxido de carbono, produzido, principalmente, na queima de combustíveis fósseis. Pesquisas sugerem que até o final do século XXI, o aumento médio da temperatura da Terra pode chegar a 6,3°C Czernichowski e Laurriol et al., 2007. Contudo, acredita-se que um aumento de no máximo 2°C ainda possa ser de menor impacto, gerando menores consequências. Brown e Caldeira, 2017 desenvolveram um modelo climático para simular o comportamento da temperatura da Terra até o final do século XXI. Este estudo demonstrou que a projeção de aquecimento global é 15% superior que as anteriormente apresentadas, refletindo em 0,5°C a mais na temperatura média da Terra. Os resultados obtidos por eles sugerem que para alcançar a meta de estabilização da temperatura global

exigirá maiores reduções de emissões de gases de efeito estufa do que o anteriormente calculado.

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, um dos principais causadores do efeito estufa. No entanto, o crescimento econômico e o aumento da oferta de energia ainda estão relacionados 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 com menor impacto ambiental.

Sabe-se que é crescente a demanda e a dependência da humanidade por energia elétrica. Desde grandes complexos industriais, passando por conglomerados comerciais, até mesmo em residências familiares, muitos são os equipamentos e dispositivos utilizados que têm como fonte de energia a eletricidade. Dentre as muitas formas de geração de energia elétrica, a queima de combustíveis fósseis é uma prática utilizada há muito tempo, sendo decisiva na evolução tecnológica de diversas sociedades no mundo. Para se ter ideia da dimensão de sua utilização, no final dos anos 90, cerca de 90% da geração de energia elétrica no mundo era proveniente da combustão Warnatz et al., 1999. Entretanto, mesmo com novas tecnologias aparecendo como possibilidades de minimização do impacto ambiental causado pelo uso de fontes não renováveis, acredita-se ainda que a dependência destas reservas ainda irá aumentar até que soluções eficientes, viáveis e renováveis sejam desenvolvidas.

Neste contexto, a combustão do carvão mineral em usinas termelétricas desempenha um importante papel, pois o carvão é um combustível ainda encontrado em abundância, com menor custo de extração e beneficiamento, em comparação com outros combustíveis fósseis. O que precisa ser feito relaciona-se neste contexto a uma otimização do processo, visando a redução das emissões e o aumento de eficiência energética, estabilizando, ou até reduzindo sua contribuição nas alterações climáticas, compensando assim o consequente aumento na utilização do carvão como fonte de energia.

O Brasil possui grandes reservas de carvão mineral, que segundo o relatório do Balanço Energético Nacional [BEN de 2016], aponta reservas descobertas de 7 bilhões de toneladas, localizadas principalmente na região sul do país.

No que tange a segurança energética do Sistema Integrado Nacional (SIN), Silva et al., 2016 realizaram um estudo que analisou a matriz elétrica do Brasil, a qual consiste principalmente de fonte hidrelétrica e, que esta fonte continuará a desempenhar um papel importante na próxima década. No entanto, apenas usinas hidrelétricas sozinhas não podem garantir a segurança do fornecimento de eletricidade. Concluíram que o risco que o Brasil está exposto a mais uma crise de eletricidade é evidente. A crise também é um resultado direto, em grande parte, a atrasos nos projetos de geração e transmissão e políticas energéticas inadequadas. O Brasil ainda prevê aumentos consideráveis no consumo de eletricidade nos próximos anos e, portanto, é necessário encontrar um equilíbrio entre as fontes renováveis, a fim de garantir fornecimento de eletricidade. O Brasil tem um enorme potencial para se tornar um líder mundial em energia limpa, mas, devido à geração intermitente de algumas fontes de energia, o papel da energia eólica, solar e hidrelétrica devem ser cuidadosamente avaliadas em um país onde a hidroeletricidade já é um elemento chave. Usinas termelétricas permitem melhor gerenciamento de fluxo de água nas principais bacias hidrográficas, a fim de atender a demanda de eletricidade nas estações secas, conferindo maior flexibilidade e confiabilidade para todo o sistema nacional de eletricidade. Maior participação de energia térmica para gerar uma carga básica deve ser considerada e também a geração de eletricidade através da biomassa, ainda pouco explorada no Brasil.

### **1.1 O cenário atual do carvão**

O carvão mineral utilizado na geração de energia em usinas termelétricas varia em sua composição dependendo da localidade na qual é extraído. O poder calorífico e a fração de impurezas neste minério sofrem variações, o que faz com que diferentes classificações surjam: carvão mineral de baixa qualidade (linhito e sub-betuminoso) e de alta qualidade ou hulha (betuminoso e antracito) [ANEEL, 2016]. A Figura 1.1 exhibe as reservas de carvão no mundo, enquanto a Figura 1.2 apresenta os tipos deste minério e suas reservas, com um enfoque na sua utilização.

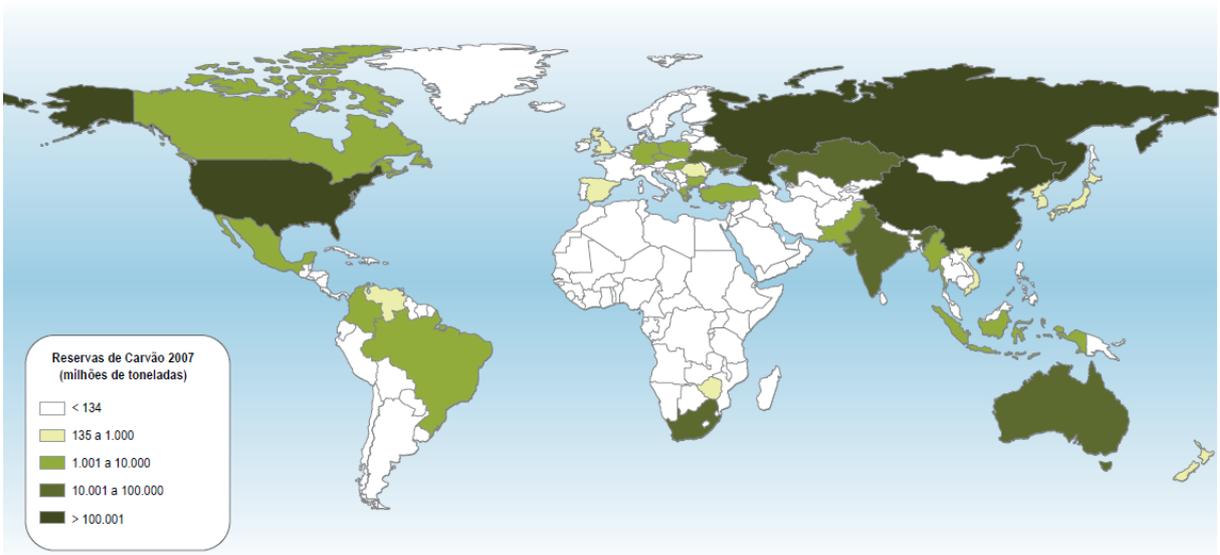


Figura 1.1 - Reservas de carvão no mundo em 2007 [ANEEL, 2016].

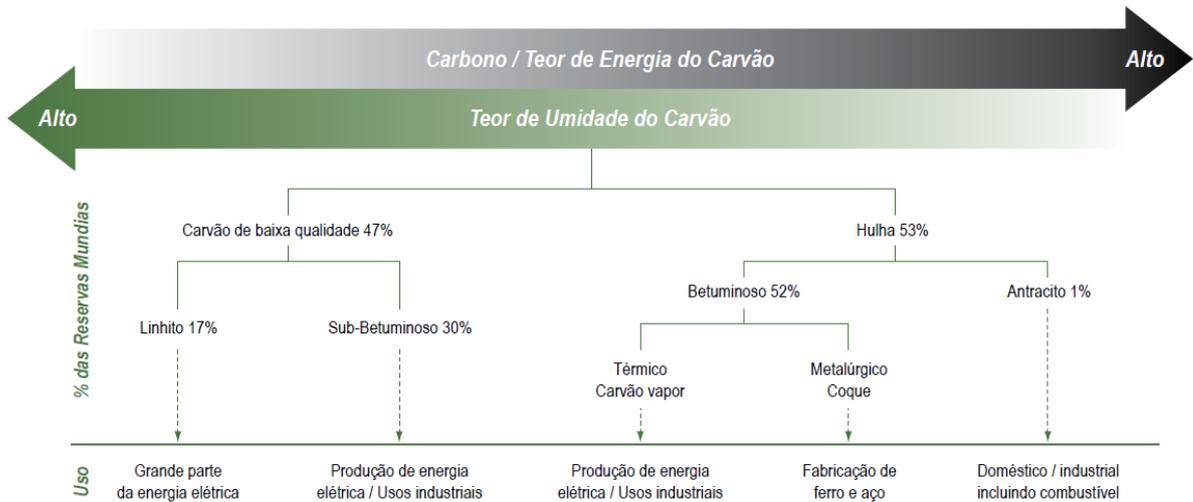


Figura 1.2 - Tipos de carvão e sua utilização [ANEEL, 2016].

As reservas de carvão mineral no Brasil são compostas majoritariamente por carvão do tipo linheiro e sub-betuminoso, ou seja, carvão de baixa qualidade, sendo que as maiores jazidas se encontram nos estados do Rio Grande do Sul (89,25%) e Santa Catarina (10,41%). As reservas nacionais já mapeadas e provadas equivalem a 1% das mundiais, com um total de aproximadamente 7 bilhões de toneladas [ANEEL, 2016]. Segundo a Associação Brasileira de Carvão Mineral (ABCM), estas reservas podem gerar até 17 GW de energia.

Infelizmente, este carvão é energeticamente pobre devido ao alto teor de impurezas presente em sua composição. Logo, o beneficiamento e o transporte ficam prejudicados do ponto de vista econômico e, por este motivo, a maioria das usinas acabam sendo comissionadas ao lado das minas de lavragem. Hoje, as principais usinas termelétricas em operação no país se concentram nos estados do Rio Grande do Sul, Santa Catarina, Ceará, Maranhão e Paraná. Sendo que as usinas do Ceará e do Maranhão, operam com carvão importado da Colômbia. Na Tabela 1.1 detalhes da localização, capacidade e os proprietários das usinas termelétricas instaladas no Brasil.

Tabela 1.1 - Termelétricas a carvão em operação no Brasil [ANEEL, 2016].

Usina	Potência [kW]	Localização	Proprietário
Charqueadas	72.000	Charqueadas - RS	ENGIE S/A
Figueira	160.250	Figueira - PR	Copel Geração S/A
Jorge Lacerda I e II	232.000	Capivari de baixo - SC	ENGIE S/A
Jorge Lacerda III	262.000	Capivari de baixo - SC	ENGIE S/A
Jorge Lacerda Iv	363.000	Capivari de baixo - SC	ENGIE S/A
Presidente Médici A, B e C	796.000	Candiota - RS	Eletrosul
São Jerônimo	20.000	São Jerônimo - RS	Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica
PECÉM I	720.000	São Gonçalo do Amarante - CE	EDP S/A
PECÉM II	365.000	São Gonçalo do Amarante - CE	ENEVA S/A
Itaqui	360.000	São Luis - MA	ENEVA S/A
Pampa Sul	340.000	Candiota - RS	ENGIE S/A

Apesar do número de usinas que operam com base neste combustível fóssil não ser expressivo, estes empreendimentos são de suma importância para a matriz energética brasileira. Com capacidade total instalada de 3,69GW, elas auxiliam as usinas hidrelétricas na geração de energia para atender a demanda energética do Brasil. Entretanto, o carvão é bastante prejudicial ao meio ambiente, tanto na sua extração quanto na queima, como já afirmado. Nas duas últimas décadas, os estudos científicos na área da combustão de carvão foram escassos no país, o que de certa maneira travou a proliferação e o desenvolvimento de novas usinas termelétricas. Frente a estes problemas e ao exposto na seção 0, estudos na área de processos de combustão envolvendo carvão são de vital importância.

É fato que a principal desvantagem do carvão como fonte de energia é o impacto ambiental resultante da emissão de poluentes gerados em sua combustão. Estes poluentes são grandes promotores do efeito estufa, além de outros impactos ambientais como chuva ácida. Diante das visíveis mudanças climáticas à nível mundial, é crescente a preocupação com a

proteção do meio ambiente e os efeitos que as atividades humanas causam sobre ele. Assim, torna-se de suma importância intensificar as pesquisas de otimização da utilização do carvão como combustível, visando aumento da eficiência dos processos e a redução da emissão dos poluentes.

## 1.2 Matriz Energética do Brasil

A Figura 1.3 apresenta as fontes de energia primária no Brasil, considerando o montante de energia fornecida ao sistema no ano de 2017. De acordo com o balanço energético nacional do Ministério de Minas e Energia [MME, 2018], cana de açúcar e lenha) representou 25,01% da energia primária consumida.

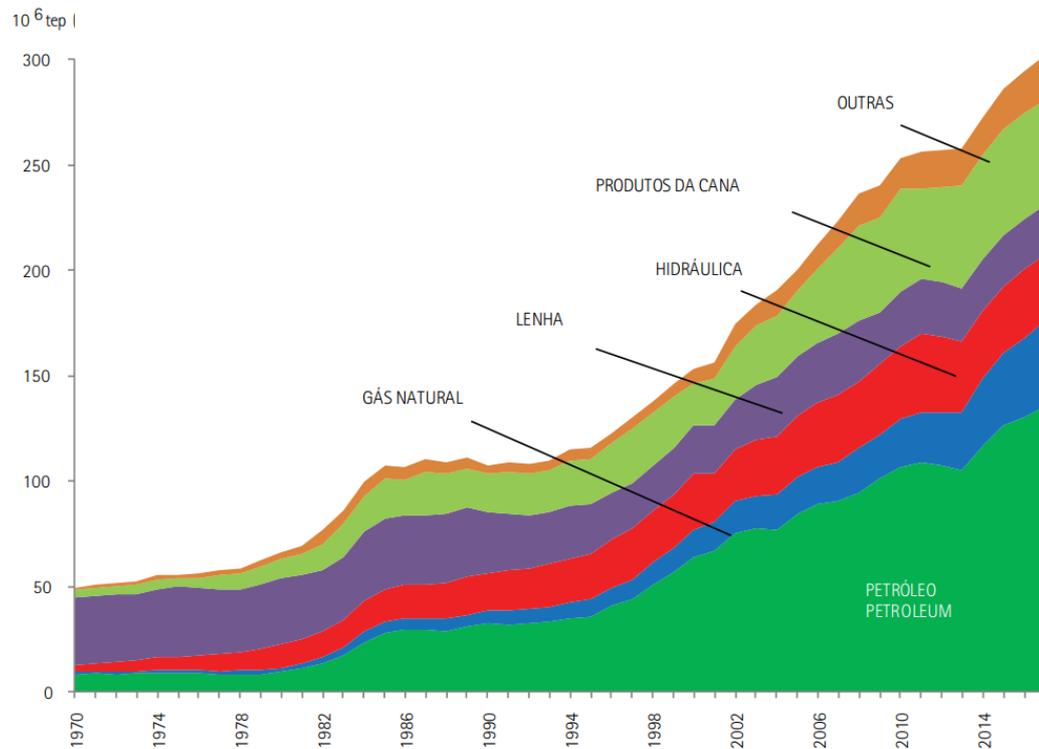


Figura 1.3 - Fontes de energia primária no Brasil [MME, 2018].

É possível observar na figura anterior o constante aumento da demanda de energia que o Brasil teve nos últimos 47 anos, assim como a representatividade de cada fonte na matriz energética, com significativo aumento do suprimento através de fontes fósseis, responsável por 56,5% da energia primária em 2017.

Ao longo das últimas 5 décadas, as fontes renováveis foram perdendo espaço na matriz energética brasileira, saindo de 62 para 43,5% de representatividade. A biomassa foi a fonte que mais perdeu espaço na matriz energética, sendo suprida em especial pelos derivados de petróleo e pela eletricidade.

Porém, o que aconteceu nas últimas décadas no setor de energia e, em especial ao de energia elétrica, não deverá se repetir nos próximos 20 anos, pois este segmento da economia está sendo transformado pelo chamado 3D's da energia, sendo eles: Descarbonização, Descentralização e Digitalização. Este movimento de transição energética é profundo e irreversível e está ocorrendo em todo o mundo.



Figura 1.4 - Megatendências do setor de energia

A descarbonização busca reduzir a participação das fontes fósseis na matriz elétrica, contribuindo para a redução das emissões de GEEs. Outro objetivo é permitir o aumento da segurança energética dos países desenvolvidos e muito dependentes da importação de recursos energéticos, uma vez que vento e sol são recursos genuinamente nacionais. Um outro componente estratégico vinculado à descarbonização é o desenvolvimento da mobilidade elétrica, a qual irá promover uma mudança radical na indústria automobilística e no setor elétrico, com a necessidade de abastecimento de milhares de carros e veículos de carga em um futuro breve, representando uma transição disruptiva do “posto ao poste”.

A descentralização refere-se às fontes de geração, com a difusão de novas fontes renováveis associadas e, em breve as baterias. Esta tendência inclui a possibilidade do consumidor ser também produtor, através da geração distribuída majoritariamente com a utilização de painéis fotovoltaicos.

A digitalização vai possibilitar às empresas do setor elétrico obterem concretos ganhos de produtividade, derivados do uso das tecnologias de informação e comunicação. Destacam-se, entre outros, o uso de robôs em processos administrativos e o processamento de *big datas* com os medidores e redes inteligentes, o que permite o conhecimento, em detalhes, dos hábitos e gastos dos consumidores, abrindo oportunidades de novos negócios.

O resultado do somatório destes três vetores será o aumento da necessidade de geração de energia elétrica na matriz energética mundial e, desta forma, o planejamento e a antecipação de ações para garantir a segurança de abastecimento de energia devem ser profundamente analisadas.

### **1.3 Revisão bibliográfica**

Atualmente os processos térmicos que envolvem qualquer tipo de combustão são uma das principais formas de conversão de energia e estão presentes no cotidiano das pessoas. Com o passar do tempo, a escassez e os elevados custos da energia vieram à tona, forçando a pesquisa, desenvolvimento de tecnologia e o domínio das reações de combustão. Com o objetivo de estudar e prever o comportamento deste fenômeno dentro dos equipamentos, a indústria tem investido nas ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC). Estas ferramentas representam uma alternativa mais rápida e econômica para avaliar processos de combustão, por permitirem criar modelos virtuais e estudar diferentes cenários. Esta técnica é capaz de fornecer, a um custo relativamente baixo, importantes informações sobre o que está ocorrendo no processo e também ajudar no dimensionamento e na otimização de sistemas e máquinas térmicas. Neste sentido, os próximos parágrafos trazem alguns importantes estudos que foram realizados e que estão relacionados com o presente trabalho.

#### **1.3.1 Emprego do CFD na combustão de carvão**

Conforme Williams et al., 2002, os modelos de combustão de carvão utilizam quatro etapas bem definidas: o aquecimento, a devolatilização, a combustão volátil e a

combustão do carbono residual; ainda utilizam sub-modelos que descrevem a formação de poluentes, formação de escória, o escoamento reativo turbulento e a transferência de calor.

Eaton et al., 1999 apresentaram uma revisão dos principais modelos aplicáveis na análise de processo de combustão, baseados nas equações fundamentais de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. A turbulência é geralmente resolvida por modelos de duas equações, como o  $k-\varepsilon$  Launder e Sharma, 1974 e o  $k-\omega$  de Menter, 1994; os modelos de combustão são baseados na cinética de Arrhenius [Kuo, 2005; Turns, 2000] ou modelos de combustão rápida como o de Magnussen *Eddy-Break-Up* (EBU) de 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 de Carvalho et al., 1991. Ainda, outros modelos para devolatilização e combustão de combustíveis sólidos e líquidos, considerando emissão de poluentes como o  $\text{NO}_x$  (óxidos de nitrogênio), são avaliados.

Na mesma linha de estudo, Xu et al., 2000 empregaram um código em CFD para analisar o processo de combustão de carvão em uma caldeira de carvão pulverizado de 350MW com 24 queimadores, equipados com promotores de vorticidade instalados na parede frontal da fornalha. Cinco casos diferentes com cargas de 100%, 95%, 85%, 70% e 50% da capacidade nominal da caldeira foram simulados. Comparações foram feitas obtendo-se uma boa concordância entre os resultados simulados e os medidos na caldeira para todos os casos, assim, validando os modelos e algoritmos empregados nos estudos computacionais.

Em outro estudo, Backreedy et al., 2005 afirmam que algumas propriedades da combustão podem ser previstas através de correlações empíricas, mas que, estas correlações não podem prever alguns parâmetros, tais como: ignição e emissão de  $\text{NO}_x$ . Em estudo posterior, Backreedy et al., 2006 utilizaram uma modelagem para a formação de  $\text{NO}_x$ , a qual é caracterizada através de um mecanismo triplo, envolvendo: *NO-Fuel*, *NO-thermal* e *NO-prompt*. A utilização destes três mecanismos em conjunto se mostrou eficiente para prever a formação deste poluente, sendo que são muito utilizadas atualmente para simulações numéricas computacionais, pois atuam em uma faixa de temperatura considerável. Vários outros autores vêm empregando códigos em CFD para estudos sobre arranjos de caldeiras, como as de carvão pulverizado com queimadores frontais, queimadores de baixo  $\text{NO}_x$  de Kurose et al., 2004, e variações das condições operacionais, como teor de umidade e tamanho

da partícula de carvão segundo Bosoaga et al., 2006; Abbas et al., 1993. Kumar e Sahu, 2007, utilizando o código Fluent, estudaram o efeito do ângulo de inclinação dos queimadores tangenciais em uma caldeira de 210 MW. Eles mostraram a influência do ângulo de inclinação no tempo de residência das partículas de carvão e, conseqüentemente, nos perfis de temperatura ao longo do eixo axial da caldeira. Asotani et al., 2008 estudaram o comportamento da ignição de carvão pulverizado em uma caldeira de 40MW. Os resultados para o carbono não queimado, (*burnout*), nas cinzas leves e para a temperatura de saída foram validados respectivamente pelos dados de operação e pelos parâmetros de projeto. Uma comparação qualitativa entre os resultados para temperatura e comportamento da ignição na proximidade dos queimadores foi feita, utilizando imagens de um sistema de câmera de alta temperatura. Posteriormente, Choi e Kim, 2009, também utilizando o código Fluent, em um estudo similar ao presente trabalho, simularam uma caldeira de 500 MW a base de carvão pulverizado com queimadores tangenciais, obtendo bons resultados.

Silva et al., 2010 analisaram através de métodos 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 de massa, quantidade de movimento, energia e de espécies químicas, assim como o modelo *k- $\omega$*  para computar a turbulência no escoamento, utilizando-se do modelo combinado de reações químicas *Eddy Break-Up/Arrhenius* para a combustão do carvão mineral. A radiação foi considerada e o modelo WSGG – *Weighted Sum Gray Gas* foi adotado para avaliar a transferência de calor por radiação 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.

Posteriormente, em um estudo desenvolvido por Crnomarkovic et al., 2013, os modelos de gás cinza e WSGG foram aplicados para as propriedades radiantes da fase gasosa e tiveram seus resultados comparados na investigação numérica de uma fornalha de queima tangencial de carvão pulverizado, utilizando o método das zonas para solução da transferência de calor radiante. Os resultados mostraram diferenças nos campos de temperatura e fluxos de calor nas paredes na ordem de 1% e 5%, respectivamente, justificando a aplicabilidade do modelo de gás cinza para a simulação deste tipo de fornalha.

Guo et al., 2015 simularam uma caldeira com queima tangencial de 200MW a qual usava carvão pulverizado como combustível, para investigar a influência do processo de oxi-combustão (*oxy-fuel*) na eficiência da caldeira. Sete simulações foram realizadas, sendo: um de ar (caso de referência) e seis outros com oxi-combustão. Foram consideradas três concentrações diferentes de oxigênio (23%, 26% e 29%), juntamente com modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  e o modelo de combustão de *Eddy Dissipation*, que foi utilizado para calcular a interação entre a turbulência e as reações em fase gasosa. Através dos resultados simulados e dos dados obtidos a partir dos cálculos de projeto da performance da caldeira, os autores descobriram que tanto a temperatura máxima quanto o fluxo de calor diminuem com o uso do modelo de oxi-combustão. Além disso, os resultados expuseram que a carga total da caldeira deverá diminuir em 5-10% sob a oxi-combustão, quando comparada com o caso de referência.

Wenjing et al., 2015 desenvolveu uma investigação numérica para estudar o processo de combustão de carvão pulverizado em uma caldeira ultra-supercrítica de 660 MW. Os autores, realizaram uma simulação numérica tridimensional com base na abordagem Euleriana-Lagrangeana, usando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  para a fase acoplada a gás, o modelo de radiação P-1 para a radiação e um modelo de duas taxas concorrentes para a desvolatilização. O objetivo do estudo foi investigar o efeito das distribuições de ar sobre o desempenho da caldeira, avaliar a temperatura no interior da câmara de combustão, os componentes das espécies e as emissões de  $\text{NO}_x$ . Como resultados, descobriram que com a aplicação de OFA (*Over-Fire Air*) e AA (*Additional Air*), ocorre uma pequena diminuição da temperatura na zona de combustão, o que provoca uma redução na formação de  $\text{NO}_x$ . Além disso, a temperatura na saída da câmara de combustão pode aumentar, melhorando assim a transferência de calor em super-aquecedores e re-aquecedores. Os autores encontraram resultados satisfatórios entre os previstos e os medidos.

Centeno et al., 2014 realizaram um estudo sobre a influência das partículas de fuligem na transferência de calor por radiação adotando os modelos de Khan e Greeves, 1974 e Magnussen e Hjertager, 1976 na formação e oxidação dos núcleos e partículas da fuligem. A escolha destes modelos fez-se necessária pois outros modelos exigem a determinação de coeficientes de correção. Esta determinação não era possível, uma vez que a câmara de combustão estudada não possuía medições experimentais de fuligem. Neste mesmo trabalho o autor analisou numericamente a transferência de calor radiativa em uma chama turbulenta de

metano-ar. Utilizando as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia, de espécies químicas gasosas e fuligem, adotou o modelo combinado de combustão de *Eddy Break Up Arrhenius* com reação química em duas etapas globais, além do modelo de turbulência *k-ε Standard*. Em relação à radiação, verificou que o modelo WSGG apresentou a maior concordância com os dados experimentais da literatura, além de concluir que a consideração das interações TRI (*Turbulence Radiation Interactions*) melhoraram os resultados.

Silva et al., 2018 realizaram um estudo em uma câmara de combustão cilíndrica, utilizando *Computational Fluid Dynamics* (CFD), o qual teve foco na contribuição dos modelos de reações químicas nos campos de temperatura e concentração de espécies químicas. Os resultados indicaram que neste caso, o modelo de cinética química global de *Eddy Break-Up/Arrhenius* (EBU/Arrhenius) de 2 passos para o metano apresentou resultados melhores para temperatura da chama e para a concentração das espécies, quando comparado com o modelo de cinética química detalhada, o *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF).

Aplicando a mesma modelagem para queima de carvão pulverizado apresentada utilizada neste trabalho, Silva et al., 2019 apresentaram um estudo em CFD sobre o efeito de vazamentos no selo d'água de uma caldeira real de uma Usina Termelétrica de 160 MW. Neste trabalho foi constatado que o vazamento de ar quando em grande quantidade afeta significativamente o processo de combustão e, em qualquer nível, pode mascarar a leitura do excesso de ar na operação da caldeira, gerando prejuízos ambientais e energéticos à planta.

### 1.3.2 Estudos com DTF

Wang et al., 2014 realizaram um estudo experimental e numérico utilizando um DTF. Neste trabalho foram testados diferentes tipos de biomassa e carvão, como: casca de arroz, madeira, caroço de oliva, carvão betuminoso de origem inglesa, a fim de avaliar a combustão e as características das cinzas de combustíveis renováveis comparando-as ao carvão betuminoso. O primeiro modelo, metamodelo, foi implementado através do MatLab – MATrixLABoratory, e consiste dos balanços de quantidade de movimento e energia para o escoamento diluído de partículas sólidas no interior do DTF. No segundo modelo, os cálculos foram realizados através do pacote Fluent, que foi configurado para simular um plano representativo do DTF, assumindo escoamento axissimétrico com a consideração de

turbilhonamento (*swirl*), em regime permanente. Neste mesmo trabalho Wang fez experimentos em um DTF, utilizando carvão e biomassa e por fim, comparando os dados numéricos com os experimentais. Os resultados revelaram que os valores de *burnout* das biomassas são comparáveis aos resultados do carvão devido a uma série de fatores que têm efeitos opostos. Em particular, destacaram a influência da maior quantidade de matéria volátil, que aumenta o *burnout*, e da sua maior umidade e maior tamanho de partícula.

Com enfoque no estudo de processos de combustão envolvendo carvão e biomassa, Mortari, 2015 avaliou o comportamento térmico de bagaço de cana-de-açúcar, de dois carvões minerais (CE4500 e PSOC1451), e suas misturas (75% carvão + 25% bagaço) em base mássica, nas seguintes atmosferas: 80% N<sub>2</sub> + 20% O<sub>2</sub> (combustão convencional), 80% CO<sub>2</sub> + 20% O<sub>2</sub> (simulando oxi-combustão), 100% CO<sub>2</sub>, 100% N<sub>2</sub> e 100% O<sub>2</sub>. As principais técnicas empregadas no estudo foram análise elementar, análise termogravimétrica (TGA), e um reator tubular de queda livre (DTF). Os resultados obtidos em DTF mostraram que, quando o processo ocorre sob atmosfera contendo CO<sub>2</sub> (típica de oxi-combustão), para todos os materiais as emissões de NO são até 34% inferiores àquelas feitas com ar atmosférico. Entretanto, efeito contrário é observado para as emissões de CO. Em relação às emissões de SO<sub>2</sub>, nenhuma tendência pode ser observada. O rendimento da queima do bagaço foi 50% superior em atmosfera de ar devido à facilidade da ignição nesta atmosfera. Para ambas as misturas também não se evidenciaram alterações de comportamento em função da atmosfera utilizada.

Recentemente, Rohloff, 2017 comparou a combustão de dois carvões minerais (um brasileiro e outro colombiano) e um carvão vegetal em um forno DTF. O equipamento foi construído no Laboratório de Combustão do Departamento de Engenharia Mecânica da UFRGS (Universidade Federal do Rio Grande do Sul) com 1,340 m de altura útil e temperatura de operação até 1200 °C. A combustão foi avaliada a 1100 °C, em termos de *burnout*, análise de temperatura e espécies químicas ao longo do comprimento do reator. Dos resultados obtidos, o carvão colombiano mostrou-se mais reativo por ter sido consumido mais rapidamente, alcançando *burnout* mais elevados do que o carvão brasileiro e o carvão vegetal. O carvão vegetal e o carvão brasileiro obtiveram *burnout* semelhantes ao longo do comprimento do forno. O carvão vegetal liberou mais CO que os carvões minerais no início da combustão. A emissão de NO foi mais alta na combustão do carvão colombiano e do

carvão vegetal porque estes concentram mais nitrogênio em sua estrutura. As emissões de  $\text{SO}_2$  também foram proporcionais ao teor de enxofre nos carvões, de maneira que o carvão brasileiro apresentou as maiores concentrações, seguido pelo carvão colombiano e por último, o carvão vegetal.

#### 1.4 Objetivos do trabalho

Objetivo do presente trabalho é apresentar uma metodologia de avaliação de um *Drop Tube Furnace* – DTF a partir do desenvolvimento de uma modelagem numérica em volumes finitos utilizando-se a dinâmica dos fluidos computacional, CFD, e da aplicação da metodologia *Design of Experiments, DoE*, (ou Projeto de Experimentos) para se obter metamodelos capazes de representar os principais resultados obtidos com o reator, e que represente a taxa de queima do carvão no DTF.

Assim, os objetivos específicos do presente trabalho são:

- a) Implementar um modelo computacional para queima de carvão em um DTF que considera os principais fenômenos envolvidos, tais como o escoamento turbulento, reativo e não isotérmicos;
- b) Validar os resultados do modelo numérico com dados experimentais;
- c) Analisar os resultados gerados por meio das simulações computacionais no que tange devolatilização dos combustíveis e as reações de combustão, assim como a taxa de queima das partículas;
- d) Avaliar a influência da radiação térmica e do meio participante no que se refere a fuligem no processo;
- e) Avaliação do processo de queima no reator para diferentes relações ar/combustível;
- f) Implantar metodologia DoE para determinar simulações e variáveis a serem adotadas nas simulações;
- g) Avaliar a influência do teor de cinzas, excesso de ar e umidade do carvão no processo de combustão e desenvolver um metamodelo para os principais resultados do reator para a combustão de carvão.

## 1.5 Contribuições da pesquisa

Este trabalho visa construir metamodelos algébricos de fácil uso para avaliar a influência do teor de cinzas, da umidade do combustível e do excesso de ar sobre o processo de combustão em um reator do tipo *Drop Tube Furnace* – DTF. As simulações efetuadas com o auxílio de Mecânica dos Fluidos Computacional – CFD oferecem um estudo detalhado do processo de combustão mas trata-se de um procedimento de implementação custosa, mas que podem ser organizadas de forma a gerar os metamodelos sem perda significativa de acuracidade.

## 1.6 Organização da tese

Este trabalho está organizado em seis capítulos e dois apêndices. O Capítulo 2 apresenta os principais modelos numéricos utilizados para o cálculo termodinâmico e combustão do carvão.

O Capítulo 3 traz a metodologia aplicada no trabalho, com as características físicas do reator utilizado, o tipo de malha gerada, análise de convergência da malha e, a validação do modelo com os dados experimentais.

No Capítulo 4, são apresentados e discutidos os resultados do modelo numérico desenvolvido no CFX<sup>®</sup> no presente trabalho. Também são detalhados os casos analisados para queima de carvão.

O Capítulo 5, é apresentada a metodologia DoE para criar um metamodelo para o problema, comparando os resultados com os dados experimentais e com o modelo numérico do CFX<sup>®</sup>.

Por fim, o Capítulo 6 apresenta as conclusões obtidas com o presente trabalho e sugestões para sequência dos estudos sobre este tema.

## 2 MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo são abordados e apresentados os principais equacionamentos matemáticos e as reações químicas envolvidas no processo de combustão de combustíveis sólidos. Em particular, maior ênfase será dada para a combustão de carvão mineral, sendo a modelagem baseada nas equações de conservação de massa, de energia, espécies químicas e de quantidade de movimento, além de modelos de turbulência, reações químicas e, por fim, modelos de radiação em meios participantes.

A modelagem da combustão de combustível sólido pulverizado baseia-se em certos pressupostos e simplificações adotadas para permitir uma solução realista usando recursos de cálculo com o conhecimento disponível do combustível. Para o presente trabalho, utilizou-se o *software* comercial Ansys CFX<sup>®</sup>, versão 15, que possui uma grande variedade de opções para implementação da modelagem.

Os modelos foram baseados na solução das equações médias de Favre (*Favre Average Navier-Stokes*) de KUO, 2005, considerando o modelo de turbulência  $k-\omega$  de MENTER, 1994 para prever a turbulência do escoamento, onde  $k$  é a energia cinética turbulenta definida pela variação das flutuações de velocidade, expressa em  $[m^2/s^2]$  e  $\omega$  é a frequência turbulenta em  $[1/s]$ . A trajetória das partículas no escoamento é prevista por um modelo Lagrangeano onde as partículas representativas são rastreadas durante suas trajetórias dentro do domínio. Uma distribuição estatística é aplicada para injeção dos combustíveis no domínio de estudo, onde os parâmetros de injeção das partículas são estimados pela sua distribuição estatística de acordo com o critério de Rosin-Rammler, considerando-se o diâmetro médio das partículas de carvão de  $55\mu m$ .

A combustão é calculada tanto para a partícula de combustível como para a fase gasosa, assumindo que as reações químicas são resolvidas tanto pela cinética química como por mistura turbulenta em reação instantânea. O balanço de energia da fase gasosa é usado para calcular a temperatura dos gases considerando a interação entre as partículas e a transferência de calor por radiação. A Figura 2.1 resume os modelos aplicados na solução matemática, sendo estes implementados no CFX.

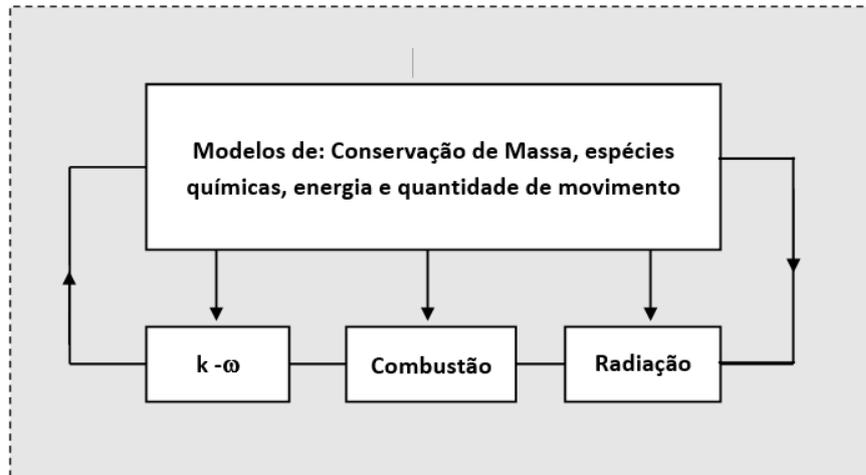


Figura 2.1 - Principais modelos utilizados.

A opção pelo emprego do modelo  $k-\omega$  ocorreu devido a obtenção de resultados mais próximos aos dados experimentais numa etapa de testes preliminares, e por ser o modelo que melhor representa o escoamento turbulento no reator, tanto próximo às paredes como no seu núcleo.

As seções a seguir apresentam a descrição dos modelos implementados no Ansys - CFX, para o presente estudo.

## 2.1 Conservação da quantidade de movimento

Para um fluido multicomponente, as equações de transporte são resolvidas para os componentes do vetor velocidade, frações mássicas de espécies químicas, pressão e temperatura (entalpia), além dos componentes do modelo de turbulência  $k-\omega$ . Entretanto, equações adicionais devem ser resolvidas para completar o modelo a fim de descrever a física real do problema.

O movimento do fluido é modelado usando campos únicos de velocidade, pressão, temperatura, espécies químicas e as componentes do modelo de turbulência. A influência dos vários componentes do fluido é sentida apenas através da variação de suas propriedades, em virtude das diferenças existentes, onde cada componente tem sua própria equação para conservação de massa. Após a aplicação das médias de Reynolds/Favre, esta equação da conservação da massa pode ser expressa em notação tensorial no regime estacionário como:

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}_\alpha \tilde{U}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_\alpha (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) - \overline{\rho_\alpha'' U_j''}] + S_\alpha \quad (2.1)$$

onde  $\tilde{\rho}_\alpha$  é a densidade mássica (ou massa específica) média do fluido para a componente  $\alpha$  na mistura,  $\rho_\alpha$  é a densidade mássica do fluido para a componente  $\alpha$  na mistura,  $\tilde{U}_j$  é o campo de velocidade média, representado como

$$\tilde{U}_j = \sum \left( \frac{\tilde{\rho}_\alpha \tilde{U}_{ij}}{\bar{\rho}} \right) \quad (2.2)$$

sendo  $\tilde{U}_{ij}$  é a velocidade mássica média do fluido para a componente  $\alpha$ ,  $\rho_\alpha (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j)$  é o fluxo de massa relativo e  $S_\alpha$  é o termo fonte para o componente  $\alpha$ , o qual inclui os efeitos das reações químicas, quando conveniente. Na Equação 2.1 o termo  $-\overline{\rho_\alpha'' U_j''}$  representa as tensões cruzadas devido as flutuações de velocidade no escoamento, e necessitará de modelagem específica para sua solução através da aplicação da aproximação de Boussinesq e do modelo de turbulência,  $k-\omega$ . Caso os termos na forma expandida da Equação 2.1 forem somados em todos os componentes, o resultado será a equação de continuidade na sua forma convencional para escoamentos incompressíveis. Assim, quando as taxas de reação química  $S_\alpha$  forem nulas,

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{U}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.3)$$

onde  $\bar{\rho}$  é a densidade mássica média da mistura.

O termo do fluxo de massa relativo é responsável pelo movimento diferencial dos componentes individuais. Este termo pode ser modelado de várias maneiras para incluir efeitos de gradientes de concentração, gradiente de pressão, forças externas ou gradiente de temperatura. Destas possíveis fontes de movimento relativo entre os componentes da mistura, o efeito primário é o do gradiente de concentração. O modelo para esse efeito dá origem a um termo semelhante à difusão na Equação 2.1, apresentado abaixo:

$$\rho_\alpha (\tilde{U}_{ij} - \tilde{U}_j) = -\frac{\Gamma_\alpha}{\rho} \frac{\partial \tilde{\rho}_\alpha}{\partial x_j} \quad (2.4)$$

O coeficiente de difusão molecular,  $\Gamma_\alpha$ , é assumido como sendo igual a  $\rho D_\alpha$ , onde  $D_\alpha$  é a difusividade cinemática do componente  $\alpha$  na mistura, e  $\rho$  é a densidade mássica nessa mistura gasosa. Definindo a fração em massa do componente  $\alpha$  na mistura gasosa como

$$\tilde{Y}_\alpha = \frac{\tilde{\rho}_\alpha}{\rho} \quad (2.5)$$

onde a soma das frações em massa sobre todos os componentes é 1, para garantir a sua conservação. Desta forma, substituindo as Equações 2.3 e 2.4 na Equação 2.1, pode-se reescreve-la sob a forma da conservação de espécies químicas da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_\alpha \tilde{U}_j \tilde{Y}_\alpha)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\alpha \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho Y_\alpha'' U_j''}) + S_\alpha \quad (2.6)$$

Os fluxos escalares turbulentos são modelados usando a hipótese de viscosidade efetiva Boussinesq, como:

$$\overline{-\rho Y_\alpha'' U_j''} = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \quad (2.7)$$

onde  $Sc_t$  é o número de Schmidt turbulento. Substituindo a Equação 2.6 na Equação 2.7 e assumindo as médias ponderadas para a massa de  $Y_\alpha$ , tem-se:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_\alpha \tilde{U}_j \tilde{Y}_\alpha)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{\alpha_{eff}} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) + S_\alpha \quad (2.8)$$

onde  $S_\alpha$  o termo fonte [kg/(m<sup>3</sup>s)], onde são previstas as taxas de reações químicas quando houver, e

$$\Gamma_{\alpha_{eff}} = \Gamma_\alpha + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (2.9)$$

A Equação 2.8 é uma equação geral de advecção/difusão da forma comum às equações resolvidas para cada uma das outras variáveis dependentes do cálculo do escoamento do fluido. Nessa equação em função das médias de Reynolds/Favre, apresenta-se a necessidade de se determinar uma viscosidade adicional aparente, propriedade do escoamento, a chamada viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ . Para tal, um modelo complementar de

turbulência pode ser utilizado, tais como os modelos  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$ , SST, dentre outros, sendo que a viscosidade turbulenta pode ser definida como  $\mu_t = \rho \frac{k}{\omega}$  para o modelo  $k-\omega$  e  $\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}$  para o modelo  $k-\varepsilon$ .

Vide que o modelo matemático considerado neste trabalho necessita da dissipação da energia cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ), considerada como a taxa na qual as flutuações de velocidade se dissipam em [ $\text{m}^2/\text{s}^3$ ], a qual é usada nos modelos de combustão,  $\varepsilon$  é calculado através da relação entre a viscosidade turbulenta dos dois modelos,  $k-\varepsilon$  e  $k-\omega$ , conforme equação a seguir  $\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}$ , sendo  $C_\mu$  uma constante empírica [adimensional] igual a 0,09.

O modelo de turbulência  $k-\omega$  utilizado neste trabalho é caracterizado por duas equações de transporte adicionais para representar as propriedades de escoamento turbulento. Esse modelo de turbulência  $k-\omega$  é mais robusto e preciso que os demais modelos RANS, pois modela o escoamento próximo às paredes para números baixos de Reynolds. As equações para energia cinética turbulenta,  $k$  [ $\text{m}^2/\text{s}^2$ ], e sua frequência turbulenta  $\omega$  [1/s] são respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j k) = \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \beta' \bar{\rho} k \omega \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \omega) = \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \bar{\rho} \omega^2 \quad (2.11)$$

onde  $\beta'$ ,  $\beta$  e  $\alpha$  são constantes empíricas [adimensionais] do modelo turbulento, que apresentam os valores 0,09, 0,075 e 5/9, respectivamente Wilcox, 1988,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\omega$  é o número turbulento de Prandtl com os respectivos valores de 1 e 2. Finalmente,  $P_k$  representa a taxa média de produção de turbulência, devido as forças viscosas [ $\text{kg}/\text{ms}^3$ ], que é obtida por:

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \quad (2.12)$$

## 2.2 Conservação de energia

Negligenciando toda a difusão multicomponente de energia devido à difusão de cada espécie químicas, ou seja, assumindo a unidade do número de Lewis, a equação de energia pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{U}_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\kappa}{C_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_{rad} \quad (2.13)$$

onde é o vetor de velocidades  $\tilde{h}$  é a entalpia média total da mistura, definida como

$$\tilde{h} = \sum_k \tilde{Y}_k \tilde{h}_k \quad (2.14)$$

sendo  $\tilde{h}_\alpha$  a entalpia total média da  $\alpha$ -ésima espécie química,  $\kappa$  a condutividade térmica da mistura,  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento, e  $\bar{S}_{rad}$  representa a fonte de energia térmica devido a transferência por radiação. O calor específico médio da mistura é dado por:

$$C_p = \sum_{k=1}^{N_k} \tilde{Y}_k C_{p,k} \quad (2.15)$$

onde  $C_{p,\alpha}$  é o calor específico  $\alpha$ -ésima espécie química,  $N_\alpha$  é o número total de espécies químicas. O termo  $\tilde{h}_\alpha$  pode ser estimado como

$$\tilde{h}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \left[ \frac{\overline{h_f^0}}{W_\alpha} + \int_{T_{ref}}^{\tilde{T}} C_{p,\alpha} d\tilde{T} \right] \quad (2.16)$$

onde  $\tilde{T}$  é a temperatura média da mistura,  $\overline{h_f^0}$  é a entalpia molar de formação,  $T_{ref}$  é a temperatura de referência e  $W_\alpha$  é a massa molecular da  $\alpha$ -ésima espécie química.

O termo  $\bar{S}_{rad}$ , que representa o termo fonte de energia térmica devido a transferência de calor por radiação é calculado através da equação a seguir:

$$\bar{S}_{rad} = -\nabla \cdot \vec{q}_{rad} \quad (2.17)$$

Para completar o modelo, a densidade mássica da mistura pode ser obtida pela equação de estado de um gás ideal. Assim,

$$\bar{\rho} = \frac{p^0 W}{\mathfrak{R}\bar{T}} \quad (2.18)$$

onde  $p_0$  é a pressão operacional da câmara de combustão, a qual é considerada constante e igual a 1 [atm],  $\mathfrak{R}$  é a constante universal dos gases e  $W$  é a massa molecular da mistura. As equações acima são válidas apenas para o núcleo da turbulência, onde  $\mu_t \gg \mu$ . Próximo às paredes adotam-se as funções de parede convencionais do modelo de turbulência utilizadas automaticamente pelo CFX.

## 2.3 Combustão

### 2.3.1 Modelagem da combustão

O modelo de reações químicas empregado nas simulações utiliza os equacionamentos EDM *Eddy Dissipation Model* de Magnussen e Hjertager, 1976 e o FRC *Finite Rate Chemistry Model* de Kuo, 2005, também chamado de modelo de Arrhenius. Estes dois modelos concorrem entre si e o que apresenta o menor valor residual de cada iteração, é o adotado para avaliação das taxas de destruição e formação das espécies químicas, sendo usado como termo fonte da equação de transporte de espécies químicas.

### 2.3.2 Eddy Dissipation Model

Para resolver o modelo de reações químicas para oxidação do combustível quando a turbulência é governante em relação as taxas de reações, ou seja, o tempo das reações devido a mistura turbulenta é muito maior que o tempo para a cinética química, adota-se o modelo *Eddy Dissipation*. Ele é baseado no conceito de que as reações químicas ocorrem rapidamente quando comparadas aos processos de transporte no escoamento. Assim, quando os reagentes se misturam a níveis moleculares, eles instantaneamente formam produtos [ANSYS, 2013]. Desta forma considera-se que a taxa de reação está diretamente relacionada ao tempo necessário para que se atinja a mistura completa dos reagentes. Há uma correlação específica para regimes turbulentos, apresentada pela expressão:

$$Taxa \propto \frac{\varepsilon}{k} \quad (2.19)$$

Ela diz que a taxa é proporcional ao tempo de mistura definida pela energia cinética turbulenta,  $k$  e a dissipação dos turbilhões,  $\varepsilon$ . Este conceito de controle de reação é aplicado na indústria em muitos problemas de combustão onde as taxas de reação são muito rápidas, quando comparadas às taxas de mistura dos reagentes. No modelo *Eddy Dissipation* a reação  $k$  é limitada pelo menor valor das duas expressões a seguir:

$$R_k = A' \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{I}{v'_{kl}} \right) \quad (2.20)$$

onde a Equação 2.20 corresponde aos reagentes. Considerando a oxidação em função de um vórtice de combustível estar envolvido por vórtices de produtos, tem-se:

$$R_k = A' B' \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\sum_p (I) W_I}{\sum_p v''_{kl} W_I} \right) \quad (2.21)$$

O termo  $I$  é a concentração molar de cada componente, em mol/m<sup>3</sup>, enquanto  $p$  representa as  $n$ -iterrações da reação  $k$ .  $W_I$  é a massa molar do componente  $I$ , em g/mol e  $v'_{kl}$  é o coeficiente estequiométrico. Os termos  $A$  e  $B$  são os coeficientes do modelo *Eddy Dissipation*, e seus valores são, respectivamente, 4 e 0,5.

### 2.3.3 Finite rate chemistry model (Arrhenius)

O modelo *Finite Rate Chemistry*, ou simplesmente modelo de Arrhenius, implementado no CFX<sup>®</sup>, considera que a taxa de progresso da reação elementar  $k$  pode ser descrita por:

$$R_k = \left( F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r'_{kl}} - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_c} [I]^{r''_{kl}} \right) \quad (2.22)$$

onde  $F_k$  e  $B_k$  são as constantes da taxa de reação no sentido direta e inversa, respectivamente,  $[I]$  concentração molar do componente e  $r$  representa a ordem de reação do componente  $I$  para a reação elementar  $k$  [ANSYS, 2013].

Para a reação elementar, o coeficiente estequiométrico é igual à ordem da reação. As taxas de reação constantes são dependentes da temperatura, e essa dependência é dada pela

equação de Arrhenius e pode ser escrita separadamente para as reações direta e inversa, conforme equações a seguir.

A constante  $F_k$  é descrita por:

$$F_k = A_{kF} T^{\beta_{kF}} e^{-\frac{E_{kF}}{RT}} \quad (2.23)$$

e, da mesma forma,  $B_k$  pode ser definida por:

$$B_k = A_{kB} T^{\beta_{kB}} e^{-\frac{E_{kB}}{RT}} \quad (2.24)$$

Nestas equações o fator pré-exponencial  $A_k$ , e suas unidades dependem da reação química modelada de Turns, 2000. O termo  $\beta_k$  é o fator de ajuste da reação,  $A_k$  é o fator de frequência,  $E_k$  é a energia de ativação, dada em [J/mol.K] e  $T$  é a temperatura absoluta em [K].

### 2.3.4 Modelo de reações químicas E–A (Eddy-Breakup-Arrhenius)

O modelo *Eddy-Break-Up-Arrhenius* é baseado em uma análise fenomenológica de combustão turbulenta que assume elevados números de Reynolds sendo aplicável a uma grande faixa de números de Damköhler. Os modelos apresentados anteriormente são comparados e adota-se o menor valor entre os dois, ou seja, a reação que ocorre com menor velocidade será a dominante segundo Eaton et al., 1999. Também são assumidas taxas finitas de reações e um processo de estado estacionário de combustão turbulenta para os voláteis. Este trabalho considera que a oxidação seja uma combinação de queima difusiva juntamente com pré-mistura, ocorrendo em duas etapas globais de reações químicas, envolvendo as seguintes espécies gasosas: O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO, NO, HCN, HCO. As equações de conservação são resolvidas para cada espécie química, exceto para o nitrogênio.

### 2.3.5 Modelo de reações NO<sub>x</sub>

A formação do NO<sub>x</sub> é um processo complexo e neste trabalho são considerados quatro mecanismos de formação de acordo com Kuo, 2005. O primeiro mecanismo é o *Thermal NO*, ou mecanismo térmico, que ocorre apenas em temperaturas superiores à 1800K. A formação do NO surge de radicais livres de duas das espécies mais abundantes nesta faixa

de temperatura, oxigênio e nitrogênio. O processo ocorre em duas etapas e é conhecida como mecanismo de Zeldovich. Segundo Kuo, 2005, este mecanismo apresenta natureza de cadeia, e devido à sua baixa taxa de formação, em comparação às reações de oxidação, pode ser desacoplado do processo de combustão. O motivo deste mecanismo ocorrer somente em altas temperaturas é que sua energia de ativação é de aproximadamente 319 kJ/kmol.

Um segundo mecanismo foi proposto por Fenimore, 1970, o qual considera que formação de NO ocorra muito rapidamente em temperaturas inferiores à 1800K quando nitrogênio e oxigênio estejam presentes. Ele é conhecido como *Prompt-NO*, ou mecanismo instantâneo, e possui energia de ativação entre 75 e 92 kJ/kmol.

O terceiro mecanismo implementado neste trabalho descreve a formação de NO em atmosferas ricas em combustível. Neste caso não há oxigênio suficiente para oxidar completamente o combustível, levando o excesso a se reduzir em NO.

O quarto e último mecanismo de formação de NO<sub>x</sub>, é denominado de *Fuel-NO*, no qual os compostos de nitrogênio presentes no combustível, principalmente na forma de heterociclos, sofrem rápida vaporização quando entram na câmara de combustão. A produção de átomos de nitrogênio na frente de chama sobre o mecanismo NO do combustível (por reações semelhantes  $\text{CH} + \text{N}_2 \rightarrow \text{HCN} + \text{N}$ ) exige muito menos energia do que a formação de átomos de nitrogênio via  $\text{N}_2 + \text{O}$ . Segundo Bowman, 1972, a taxa de formação de NO via compostos contendo nitrogênio (diferente do NO térmico) ocorre em escala de tempo comparável às das reações de combustão.

Em combustão de carvão os mecanismos de *Fuel-NO* e *Thermal-NO* são mais importantes, devido a temperatura na câmara de combustão e ao excesso de ar utilizado.

## 2.4 Combustão de combustíveis sólidos

Na combustão de combustíveis sólidos, uma combinação de vários subprocessos representa o processo global de conversão termoquímica das partículas de combustível. Em geral, a composição dos combustíveis sólidos (carvão) é dividida em quatro classes, nomeadamente umidade, material volátil, carbono fixo e teor de cinzas. Tipicamente, o processo de combustão é dividido em diferentes estágios: aquecimento, secagem, desvolatilização, combustão homogênea em fase gasosa e reações heterogêneas de superfície das partículas (oxidação e gaseificação). Dependendo das condições operacionais e da

natureza do sistema, esses processos podem ser sequenciais ou em sobreposição. Em geral, o resíduo da combustão é apenas o teor de cinzas do combustível. A Figura 2.2 apresenta os processos que uma partícula sólida típica sofre durante a combustão.

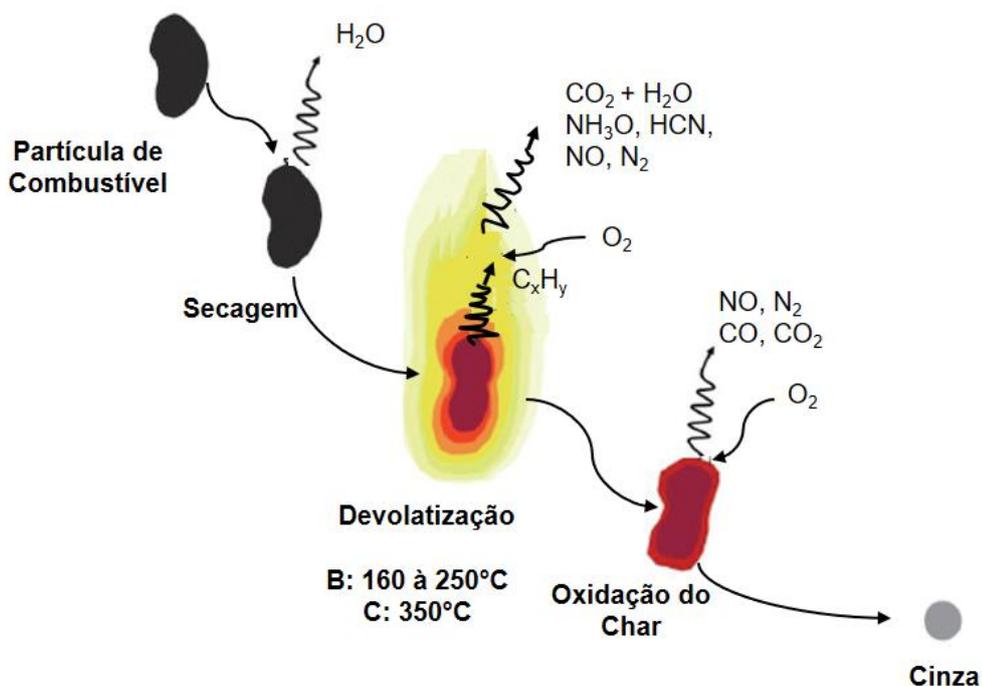
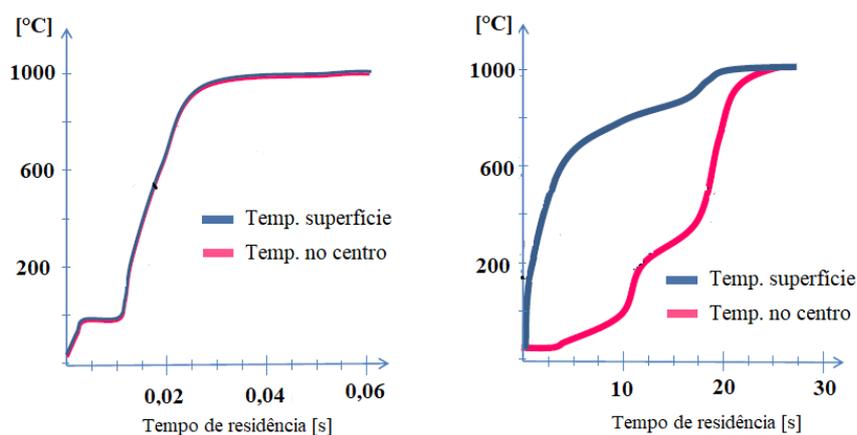


Figura 2.2 - Representação dos estágios de combustão dos combustíveis sólidos [Adaptado de Karlstrom, 2017].

A conversão de combustível sólido começa com o aquecimento das partículas sólidas através de convecção e radiação dos gases quentes circundantes e eventual condução das partículas vizinhas. Em resumo, conforme a partícula aquece, o calor é conduzido através de seu volume por condução e, começa o processo de secagem. Conseqüentemente, como a camada externa das partículas de combustível secam e a temperatura atinge um determinado valor, a devolatilização começa. Durante esta etapa, vários processos físicos e químicos ocorrem liberando espécies gasosas voláteis, sendo o *char* formado como o resíduo carbonoso. Os gases voláteis liberados reagem com o ambiente circundante e queimam em uma chama difusiva. O calor gerado é transferido para a partícula gerando devolatilização adicional (ou secagem). Além disso, através da conversão, espécies reativas podem atingir a superfície da partícula e os resíduos de carvão reagem com o oxigênio atmosférico, gerando vapor de água, dióxido de carbono e monóxido de carbono entre outros de menor relevância.

Em condições ideais, o resíduo da combustão é apenas o teor de cinzas do combustível, que fica no fundo da câmara de combustão ou é arrastado pelo fluxo dos gases de combustão.

Outro comportamento observado refere-se à proximidade que a temperatura na superfície da partícula de combustível tem com a temperatura dos gases. A Figura 2.3 apresentam a temperatura de duas partículas de combustível, sendo uma de 50  $\mu\text{m}$  e outra de 6mm, quando expostas a uma temperatura de 1.000  $^{\circ}\text{C}$ .



(a) Partícula com diâmetro de 50 $\mu\text{m}$       (b) Partícula com diâmetro de 6mm

Figura 2.3 - Temperatura na superfície e no centro das partículas de carvão, quando submetidas a uma temperatura de 1.000  $^{\circ}\text{C}$  [Adaptado de Karlstron, 2017].

Na Figura 2.3(a) observa-se a temperatura na superfície e no centro de uma partícula com diâmetro de 50  $\mu\text{m}$ , similar as utilizadas na modelagem do presente trabalho. Devido ao tamanho reduzido da partícula e a hipótese de que estas se comportam como um corpo negro, as temperaturas na face e no centro possuem comportamentos idênticos e as etapas de secagem e devolatilização ocorrem na sequência. Para partículas de maior diâmetro, o efeito da condução térmica interfere nas etapas de secagem e devolatilização, as quais ocorrem simultaneamente durante 18s, conforme atingimento da temperatura de devolatilização do carvão betuminoso (350 a 400  $^{\circ}\text{C}$ ), e devido ao gradiente de temperatura no interior da partícula, conforme representado na Figura 2.3(b). Outra diferença a se destacar no comportamento das duas partículas de combustível (50  $\mu\text{m}$  vs 6 mm), é o tempo necessário para devolatilização e oxidação total do combustível, sendo que na partícula de menor tamanho estes processos levam 30 ms, enquanto que para a partícula maior são necessários aproximadamente 25 s para a combustão completa.

### 2.4.1 Modelo de combustão da partícula

A modelagem da combustão da partícula é utilizada para a determinação da temperatura, trajetória da partícula, secagem, devolatilização, oxidação do carbono residual e concentração de espécies químicas tanto da mistura gasosa como para as partículas de carvão, cinzas e o carbono residual, verificando-se a influência dos parâmetros operacionais, como condições heterogêneas para o combustível e escoamento de ar durante a combustão.

O esquema cinético para a pirólise de partículas de carvão utilizado neste trabalho foi apresentado por Silva et al., 2010 e Silva et al., 2019, e assume que o carvão mineral é composto de carvão bruto (*rawcoal*), cinza (*ash*), água na forma de umidade e carbono residual (*char*). O carvão decompõe-se em carbono residual e gases voláteis através de duas reações paralelas e concorrentes ( $R_{1,c}$  e  $R_{2,c}$ ) de desvolatilização, segundo o modelo proposto por Ubhayakar et al., 1976. As cinzas e a água presentes na partícula de carvão podem ser consideradas como impurezas do carvão, pois não produzem energia.

O carbono residual, é uma partícula composta essencialmente por carbono. Durante o processo de combustão, o carvão bruto decompõe-se em diversas frações. Inicialmente ocorre a secagem, que é a retirada da umidade da partícula. Há em seguida, o processo de devolatilização, onde separam-se da partícula sólida os gases voláteis, restando o carbono residual e as cinzas. Finalmente ocorre a oxidação dos gases voláteis e do carbono residual, restando apenas a fração de cinzas na partícula sólida.

A decomposição global da partícula de carvão é apresentada na Figura 2.4. As partículas de carvão são tratadas como esferas contendo reações internas.

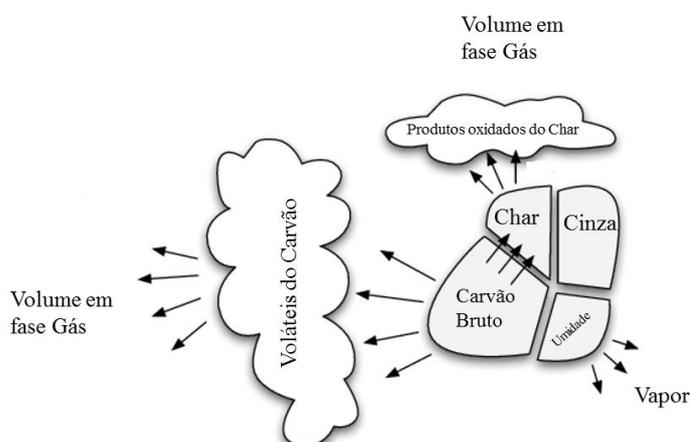


Figura 2.4 - Ilustração da partícula de carvão durante a desvolatilização [Adaptado de Conrado et al., 2015].

A solução das equações apresentada nesta seção se concentrará no tratamento Lagrangeano das partículas e acoplamento bidirecional entre as fases gasosa e sólida, que são comumente usados em simulações de combustão.

No modelo *Discrete Phase Model* (DPM) do ANSYS, as partículas são tratadas de maneira Lagrangeana e seu efeito no campo de escoamento é incluído nas equações da fase contínua via termos fonte (acoplamento bidirecional). Portanto, as partículas podem trocar calor, massa e quantidade de movimento com a corrente de gás. A estratégia para a simulação é alternar entre a forma Euleriana para cálculos de fluxo e lagrangeana para cálculo da trajetória da partícula, desde que a solução convergente seja obtida. As seções a seguir representam a teoria do modelo DPM.

#### 2.4.2 Trajetória da partícula

A temperatura, composição e velocidade da partícula de carvão ao longo de sua trajetória são calculadas usando o modelo Lagrangeano. As equações de movimento da partícula são:

$$\frac{dx_p}{dt} = u_p \quad (2.25)$$

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = f_D + f_g \quad (2.26)$$

onde  $f_D$  é a força de arraste e  $f_g$  a força gravitacional. A força de arraste é calculada através da seguinte equação:

$$f_D = m_p \frac{u_{g.inst} - u_p}{\tau_r} \quad (2.27)$$

Quando a dispersão da turbulência da partícula pela fase de gás é incluída no modelo CFD, as equações para a trajetória da partícula são integradas usando a velocidade instantânea do fluido. Assim,  $u_{g.inst} = U_g + u'$ , onde  $u'$  é a velocidade turbulenta flutuante calculada de acordo com Gosman e Ioannides, 1981. Quando a dispersão da turbulência da partícula não é incluída, a velocidade média do gás é usada,  $u_{g.inst} = U_g$ .

O tempo de relaxação da partícula  $\tau_r$  para a força de arraste é definida como:

$$\tau_r = \frac{\rho_p d_p^2}{18u_g f_D} \quad (2.28)$$

sendo que o coeficiente de arraste,  $f_D$ , definido por Schiller Naumann, 1933, válido para uma partícula esférica como:

$$f_D = \begin{cases} 1 + 0,15Re_p^{0,687}, & Re_p \leq 1000 \\ 0,01833Re_p, & Re_p > 1000 \end{cases} \quad (2.29)$$

### 2.4.3 Aquecimento e resfriamento inerte da partícula

A temperatura da partícula,  $T_p$ , é obtida através da resolução da equação de balanço de energia na partícula, a qual é aquecida via convecção e radiação, conforme equações a seguir. Assim,

$$m_p C_p \frac{T_p}{dt} = Q_C + Q_R - Q_M \quad (2.30)$$

$$m_p C_p \frac{T_p}{dt} = hA_p(T_\infty - T_p) + \varepsilon_p A_p \sigma (\Theta_R^4 - T_p^4) - \dot{M}_p L \quad (2.31)$$

onde  $m_p$  e  $C_p$  são a massa e o calor específico da partícula. Os termos  $Q_C$ ,  $Q_R$  e  $Q_M$  são transferências de energia para a partícula devido à convecção, radiação e evaporação da água respectivamente,  $h$  coeficiente de transferência de calor por convecção,  $A_p$  área da superfície da partícula,  $T_\infty$  é a temperatura do gás circundante,  $T_p$  é a temperatura da partícula,  $\varepsilon_p$  emissividade da face da partícula,  $\sigma$  constante de Stefan-Boltzmann,  $\Theta_R = (G/4\sigma)^{1/4}$  é a temperatura radiante, sendo  $G$  a radiação incidente na partícula,  $\dot{M}_p$  é a massa de água e  $L$  o calor latente da água. Durante a resolução a Equação 2.31 a partícula é considerada isotérmica.

### 2.4.4 Modelo de secagem da partícula

As reações que ocorrem na partícula de carvão se desenvolvem nos pontos indicados na Figura 2.5. A parcela de cinzas não participa de nenhuma reação, sendo que ela acompanha a partícula sólida até a reação final de oxidação do carbono residual.

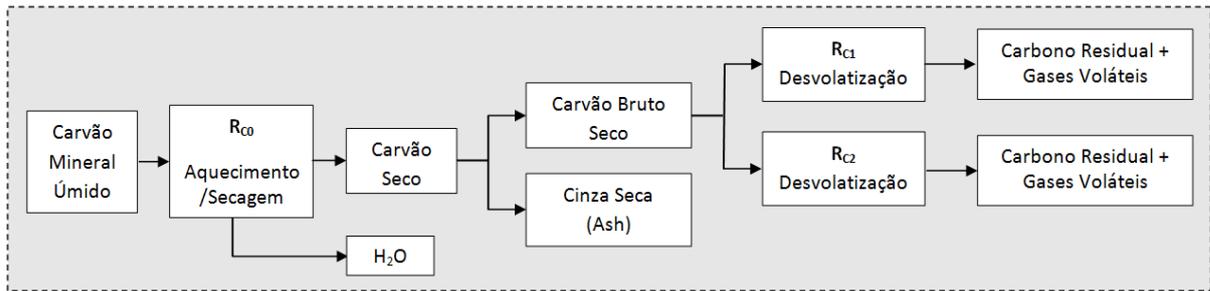


Figura 2.5 - Modelo de devolatilização do carvão com secagem [Ubhayakar et al., 1976 e Xianchun et al., 2009].

Para a secagem das partículas as Equações 2.30 e 2.31 de transferência de calor da partícula são aplicadas, sendo o fluxo de calor por evaporação é representado por  $Q_M$ . Também adotou-se o modelo baseado no trabalho de Xianchun et al., 2009, onde a taxa da reação de secagem  $R_{CO}$  *Coal Drying* é prescrita pelo modelo de Arrhenius, que prevê a evaporação da umidade presente na partícula a uma temperatura de 373 K, resultando em carvão seco e vapor de água. Assim,

$$R_i = A_{r,i} e^{-\frac{E_i}{\Re T}} \quad (2.32)$$

onde  $R_i$  é a constante de velocidade da reação em  $[s^{-1}(\text{mol}\cdot\text{m}^{-3})^{(1-n)}]$ ,  $A_r$  é o fator pré-exponencial da equação de Arrhenius, em  $[1/s]$ ,  $E$  é a energia de ativação em  $[J/mol]$ ,  $\Re$  é a constante universal dos gases em  $[J/mol\cdot K]$ ,  $T$  é a temperatura em  $[K]$  e o subscrito  $i$  refere-se às  $i$  - reações do modelo. Para a reação  $R_{CO}$ , segundo Xianchun et al., 2009, o fator pré-exponencial  $A$  e a energia de ativação  $E$  valem, respectivamente,  $4,587 \times 10^{12} \text{kg}^{-2} \text{m}^6 \text{s}^{-1}$  e  $78,995 \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

#### 2.4.5 Modelo de devolatilização da partícula

Para combustíveis que se apresentam na fase gasosa em condições atmosféricas normais como metano, propano e butano, as reações de combustão ocorrem exclusivamente na fase gasosa. Entretanto, para materiais na fase líquida ou sólida é necessário que primeiro ocorra a separação dos componentes voláteis. Este processo é denominado desvolatilização no caso de sólidos e evaporação para o caso de líquidos.

A devolatilização da partícula de carvão é assumida como sendo linearmente dependente da quantidade de voláteis da partícula, sendo:

$$\frac{dm_p}{dt} = -k_c \max[0, m_p - (1 - f_{v,0})m_{p,0}] \quad (2.33)$$

onde  $m_p$  é a massa instantânea de partículas,  $m_{p,0}$  é a massa inicial de partículas.  $f_{v,0}$  é a fração de massa de voláteis inicialmente presentes na partícula e  $k_v$  é a taxa cinética definida como:

$$k_v = A_c e^{-\frac{T_c}{T_p}} \quad (2.34)$$

onde o termo pré-exponencial  $A_c$  depende do tipo de carvão, dado em  $[\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}]$ .  $T_c$  é a temperatura de ativação e  $T_p$  é a temperatura da partícula, dados em  $[\text{K}]$ .

Para o caso da partícula de carvão, a desvolatilização é representada pelas reações  $R_{C1}$  e  $R_{C2}$ , presentes na Figura 2.5. O modelo de desvolatilização do carvão, utilizado neste trabalho, foi proposto por Ubhayakar et al., 1976, que considera que o processo ocorre em dois estágios paralelamente:

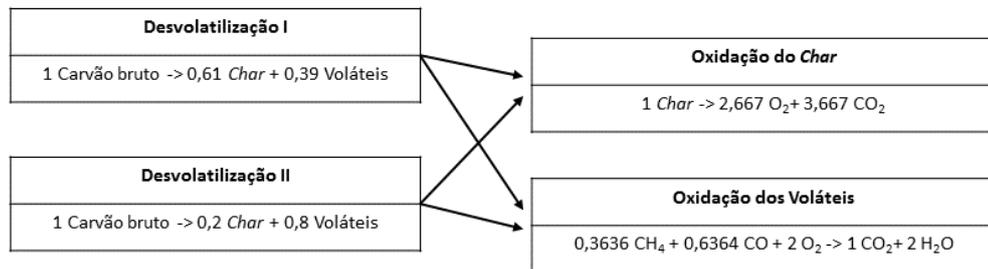


Figura 2.6 - Esquema de reações químicas do carvão bruto [Ubhayakar et al., 1976]

Este modelo é indicado para carvão betuminoso e a primeira reação predomina nas partículas com baixa temperatura tendo rendimento designado como  $Y_1$  [ANSYS 2013]. Nas temperaturas mais altas, o rendimento é apresentado como  $Y_2$ . Como resultado, as frações finais de voláteis dependerão do histórico de temperatura da partícula, crescendo com o aumento da mesma, e seu valor final ficará entre  $Y_1$  e  $Y_2$ . Considera-se que a partícula é composta por quatro frações: fração de carvão bruto  $C_0$ , fração de carbono residual,  $C_{ch}$ , fração de voláteis,  $V$ , e fração de cinzas,  $C_{ash}$ , todas expressas em kg/kg. A fração de cinzas da partícula seca,  $C_{ash}$ , é expressa como  $1 - C_{ch} - C_0 - V$  (fração total, subtraindo o carbono residual, umidade e voláteis). A taxa de conversão do carvão bruto é descrita por:

$$\frac{dC_o}{dt} = -(k_1 + k_2)C_o \quad (2.35)$$

sendo que  $C_o$  é a fração de carvão bruto,  $k_1$  e  $k_2$  as taxas de reação, obtidas pela equação de Arrhenius, Equação 2.32.

A taxa de produção de compostos voláteis, dada em kg/s, pode ser obtida por:

$$\frac{dV}{dt} = -(Y_1k_1 + Y_2k_2)C_o \quad (2.36)$$

O valor de  $Y_1$  é obtido a partir da análise aproximada do carvão e, de  $Y_2$ , é obtido a partir da devolatilização em alta temperatura. A taxa de formação de carbono residual é obtida através de

$$\frac{dC_{ch}}{dt} = ((1 - Y_1)k_1 + (1 - Y_2)k_2)C_o \quad (2.37)$$

onde os termos  $A_1$ ,  $E_1$ ,  $A_2$  e  $E_2$  são definidos por Ubhayakar et al., 1976, com valores  $1,34 \times 10^5$  [ $s^{-1}$ ], 8852 [K],  $1,46 \times 10^{13}$  [ $s^{-1}$ ], 30189 [K], respectivamente.

#### 2.4.6 Modelo de oxidação do carbono residual

O modelo de reação global é usado para calcular a oxidação do carbono residual, conforme equação a seguir:

$$\frac{dm_{p,c}}{dt} = -\pi d_p^2 \rho_g R T_g \left( \frac{X_{O_2}}{M_{O_2}} \right) R_T \quad (2.38)$$

onde  $m_{p,c}$  é massa de carbono residual na partícula,  $\frac{dm_{p,c}}{dt}$  é a taxa de oxidação do carbono residual em CO,  $d_p$  é o diâmetro da partícula,  $X_{O_2}$  é a fração molar de oxigênio na superfície,  $M_{O_2}$  é a massa molecular do oxigênio.  $R_T$  é a taxa geral de reação, calculada por:

$$R_T = \left( \frac{k_d^{-1}}{k_c^{-1}} \right)^{-1} \quad (2.39)$$

sendo  $k_d$  a taxa de difusão do oxigênio e  $k_c$  o coeficiente de taxa química.

A taxa de difusão do oxigênio por unidade de área na superfície da partícula é definida por  $k_d(X_g - X_s)$ , sendo  $X_g$  a fração molar de oxigênio nos gases da câmara de combustão e distante da partícula, e  $X_s$  é a fração molar de oxigênio na superfície da partícula. O coeficiente  $k_d$  pode ser obtido através da equação:

$$k_d = \frac{D_{ref}}{r_p} \left( \frac{T_p + T_g}{2 \cdot T_{ref}} \right)^{\alpha_1} \frac{P_A}{P} \quad (2.40)$$

onde  $r_p$  é o raio médio da partícula em [m],  $T_p$  é a temperatura da partícula dada em [K],  $T_g$  é a temperatura média dos gases no entorno da partícula, em [K],  $T_{ref}$  é a temperatura de referência, sendo usada 293 [K]. O termo  $P_A$  é a pressão atmosférica,  $P$  é a pressão local, ambas em [Pa],  $D_{ref}$  é a difusividade dinâmica em [kg.m<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>]. O termo  $\alpha_1$  é um expoente de ajuste com valor de 0,75 [ANSYS, 2013].

A taxa de reação química do carbono residual,  $k_c$ , é calculado pela seguinte equação:

$$k_c = A_c e^{\left( -\frac{T_c}{T_p} \right)} \quad (2.41)$$

onde  $A_c$  é o fator pré exponencial e  $T_c$  é a temperatura de ativação da oxidação do carbono residual e  $T_p$  a temperatura da partícula.

Na fase de gás, adotou-se o modelo de cinética química simplificada para o metano em dois passos, WD<sub>2</sub>, desenvolvido por Westbrook e Dryer, 1981, que considera o processo de combustão desenvolvendo-se a taxas globais finitas. A oxidação do CO para o CO<sub>2</sub> e a reação de oxidação do CH<sub>4</sub> para o CO se dá por:



onde  $c_1$  e  $c_2$  são as taxas de oxidação para CH<sub>4</sub> e para o CO, respectivamente.

#### 2.4.7 Modelo para cálculo do diâmetro da partícula

O modelo utilizado pelo CFX para cálculo do diâmetro da partícula utilizada como premissa o conceito de volume constante e densidade variável durante as etapas de

secagem e devolatilização, e de densidade constante e volume variável para a etapa de oxidação do carbono residual. Estes conceitos são fundamentais para a modelagem da variação do diâmetro e da densidade da partícula durante a trajetória no reator.

Normalmente, a partícula de carvão dilatará devido à liberação de gás durante a fase de devolatilização. O modelo pressupõe que o diâmetro das partículas mude proporcionalmente aos voláteis liberados e deve ser especificado um aumento no diâmetro médio da partícula de carvão após a devolatilização completa como entrada para o modelo. A alteração do diâmetro das partículas devido à dilatação é calculada usando a seguinte equação:

$$\frac{d}{dt}d_p = C_s d_{0,p} \frac{|\dot{m}_{ref}|}{\dot{m}_{ref,0}} \quad (2.44)$$

sendo  $d_p$  o diâmetro da partícula instantâneo,  $C_s$  o coeficiente de dilatação,  $d_{0,p}$  o diâmetro das partículas no início da devolatilização,  $\dot{m}_{ref}$  é a taxa de variação da massa do material de referência,  $\dot{m}_{ref,0}$  é a massa do material de referência no início da devolatilização. Quando o coeficiente de dilatação for igual a zero, o diâmetro das partículas permanece constante durante a devolatilização.

A equação para massa específica constante é descrita abaixo, com a qual obtém-se o diâmetro da partícula durante a fase de oxidação do carbono residual.

$$\frac{\pi\rho d_{p0}^3}{6} - \frac{\pi\rho d_p^3}{6} = (V_0 + C_0) - (V + C) \quad (2.45)$$

sendo que  $\rho$  é a densidade da partícula,  $d_{p0}$  e  $d_p$  são o diâmetro inicial e no instantâneo da partícula,  $V$  e  $C$  são a massa de voláteis e do carbono residual do carvão respectivamente.

## 2.5 Modelagem da nucleação e combustão de fuligem

A modelagem da formação e oxidação da fuligem é ainda um dos principais desafios dentro de problemas de combustão, sendo objeto de várias pesquisas recentes. De acordo com Kuo, 2005, são denominadas de fuligem as partículas sólidas, carbônicas, originadas de componentes voláteis de combustíveis líquidos ou sólidos. Formando aglomerados de pequenas partículas grosseiramente esféricas, seu tamanho pode variar de 0,005 a 0,2  $\mu\text{m}$ , sendo mais comuns partículas de 0,01 a 0,05  $\mu\text{m}$ . Geralmente partículas de

fuligem são compostas de um grande número de cristais lamelares que contêm, em média, de 5 a 10 folhas, cada uma com aproximadamente 100 átomos de carbono.

No modelo de formação de fuligem de Magnussen e Hjertager, 1976, assume-se que a fuligem é formada na fase gasosa, após a devolatilização dos combustíveis, sendo em dois estágios, onde o primeiro representa a formação do núcleo:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{X}_N)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{X}_N)}{\partial x_j} = \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial\tilde{X}_N}{\partial x_j} \right\} + \tilde{S}_{nuclei,f} + \tilde{S}_{nuclei,c} \quad (2.46)$$

o segundo estágio representa a formação da partícula de fuligem, a partir deste núcleo:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_S)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_S)}{\partial x_j} = \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial\tilde{Y}_S}{\partial x_j} \right\} + \tilde{S}_{soot,f} + \tilde{S}_{soot,c} \quad (2.47)$$

As equações de transporte são resolvidas para a concentração específica do núcleo do radical,  $X_N$  dado em mol/kg, e a fração mássica de fuligem  $\tilde{Y}_S$  em kg/kg de Tesner, 1971.

O modelo completo pode ser subdividido em três etapas independentes. A primeira é a formação dos núcleos e partículas de fuligem, de acordo com o modelo de Tesner et al., 1971. A segunda etapa trata da combustão dos núcleos e das partículas de fuligem. Fechando o modelo, levando-se em conta o efeito da turbulência sobre as taxas das reações químicas, adotando-se o modelo de *Eddy Dissipation Concept* (EDC), proposto por Magnussen e Hjertager, 1976. Nele são calculados os termos  $\tilde{S}_{nuclei,f}$  e  $\tilde{S}_{nuclei,c}$  da Equação 2.46 e os termos  $\tilde{S}_{soot,f}$  e  $\tilde{S}_{soot,c}$ , da Equação 2.47. Nas Seções 2.5.5.1 e 2.5.5.2 são apresentados os detalhes do modelo de formação e combustão da fuligem, respectivamente. Outros modelos, como o de Khan e Greeves, 1974, são aplicados em diversos trabalhos de pesquisa no mesmo segmento, e podem ser alternativas futuras para a extensão deste trabalho.

### 2.5.1 Formação de fuligem

O modelo de formação da fuligem proposto por Tesner, 1971 busca representar a formação dos núcleos e das partículas de fuligem de forma simplificada, conforme equações a seguir.

A formação de núcleos e partículas de fuligem é calculada seguindo os modelos empíricos de Tesner, 1971, apresentados à seguir. Os termos fonte são formulados em concentração de partículas, em [parte/m<sup>3</sup>].

$$C_N = \rho \cdot A \cdot X_N \quad (2.48)$$

onde A é o número de Avogadro, dado de 6,0221x10<sup>23</sup> [parte/mol].

As partículas de fuligem, em [parte/m<sup>3</sup>]

$$C_S = \rho \cdot \frac{Y_S}{m_p} \quad (2.49)$$

$$m_p = \rho_{soot} \pi \frac{d^3}{6} \quad (2.50)$$

onde  $m_p$  é a massa da partícula de fuligem,  $\rho_{soot}$  é a densidade [kg/m<sup>3</sup>] e  $d$ , é o diâmetro médio das partículas de fuligem [m]. Com estas definições, os termos de origem para a formação dos núcleos de fuligem podem ser modelados de acordo com Tesner et. al., 1971, como:

$$\tilde{S}_{nucleo,f} = n_0 + (f - g)C_N - g_0 C_N C_S \quad (2.51)$$

$$\tilde{S}_{soot,f} = m_p (a - b C_S) C_N \quad (2.52)$$

onde  $n_0$  é a taxa de formação espontânea dos núcleos dada em [parte/m<sup>3</sup>s],  $C_N$  é a concentração de núcleos em [parte/m<sup>3</sup>]. O termo  $f$  é um coeficiente linear de ramificação,  $g$  é o coeficiente linear de terminação, sendo o resultado de  $(f - g)$  100 [1/s],  $g_0$  descreve o coeficiente de terminação das partículas de fuligem, sendo este 1x10<sup>-15</sup> [m<sup>3</sup>/s/parte], enquanto  $C_S$  representa a concentração das partículas de fuligem formadas, dada em parte/m<sup>3</sup>. Os termos  $a$  e  $b$  são constantes e valem 1x10<sup>5</sup> [1/s] e 8x10<sup>-14</sup> [m<sup>3</sup>/s/parte], respectivamente.

A equação é simplificada, agrupando-se o termo  $n_0$ , que é dado por:

$$n_0 = a_0 \cdot f_c \cdot \rho \cdot Y_{fuel} \exp\left(\frac{-T_{A,0}}{T}\right) \quad (2.53)$$

Nesta expressão  $a_0$  é uma constante de valor 1,35x10<sup>37</sup> [parte/kg/s],  $f_c$  representa a concentração mássica de carbono no combustível, em [kg/m<sup>3</sup>],  $T_{A,0}$  é adotado o valor de 90.000 [K].

### 2.5.2 Combustão de fuligem

Uma vez formados os núcleos e as partículas de fuligem, parte deles sofrem um processo de combustão que deve ser modelado especificamente. A taxa de combustão de fuligem é determinada pela equação abaixo:

$$R_{s,c} = A \cdot \bar{C}_s \cdot \left( \frac{\varepsilon}{k} \right) \quad (2.54)$$

Esta equação pode ser utilizada para regiões onde a concentração média de fuligem é baixa, quando comparada à concentração de oxigênio. Em regiões de baixa concentração de  $O_2$  é a sua concentração que limitará a taxa de combustão das partículas de fuligem. Apesar de as partículas de fuligem representarem uma pequena fração na massa total de espécies no processo de combustão, elas deverão competir pelo oxigênio com todos os combustíveis não queimados segundo Magnussen e Hjertager, 1976. Assim a equação correta para esta condição é:

$$R_{s,c} = A \left( \frac{\bar{C}_{O_2}}{r_s} \right) \left( \frac{\varepsilon}{k} \right) \left( \frac{C_s \cdot r_s}{\bar{C}_s \cdot r_s + \bar{C}_f \cdot r_f} \right) \quad (2.55)$$

onde  $\bar{C}_s$  representa a concentração média local de fuligem em  $kg/m^3$ , e  $r_s$  é a razão estequiométrica de oxigênio, necessária para realizar a combustão de 1 kg de fuligem. Dentre a Equação 2.54 e a Equação 2.55, a que apresentar a menor taxa de reação, determina a taxa de combustão da fuligem.

## 2.6 Modelagem da radiação térmica

Todas as substâncias emitem radiação eletromagnética continuamente devido à agitação molecular associada à sua energia interna. A radiação está presente em todos os processos, e pode ser sentida de diversas formas, desde a percepção do espectro de radiação visível ao olho humano, até a captação de energia térmica radiante pela pele. O efeito da radiação pode ser detectado em diversas situações, entretanto, sua importância é elevada quando os níveis de temperatura absoluta dos corpos e meios são mais altos de acordo com Siegel e Howell, 1968. Desta forma, processos como a combustão em fornalhas e câmaras de

combustão, que ocorrem à altas temperaturas, dependem fortemente da transferência radiante, logo seu entendimento é de fundamental importância.

A radiação é afetada por diversos fatores e entre os mais significativos apresentam-se as condições de superfície, características direcionais, e o meio pelo qual a radiação é propagada. Os meios que possuem a capacidade de interferir na radiação, são denominados meios participantes e toma-se como exemplo a atmosfera rica em H<sub>2</sub>O e CO<sub>2</sub>, principais produtos da combustão de hidrocarbonetos.

### 2.6.1 Equação da transferência radiativa - ETR

Pode-se definir formalmente o calor trocado por radiação térmica como a taxa na qual energia radiante é emitida no comprimento de onda  $\lambda$  na direção  $(\theta, \phi)$ , por unidade de área da superfície emissora normal a essa direção, por unidade de ângulo sólido no entorno dessa direção e por unidade de intervalo de comprimento de onda  $d\lambda$  no entorno de  $\lambda$  segundo Siegel e Howell et al., 2002.

A intensidade espectral definida acima depende fortemente de variáveis geométricas, e possui unidades de W/(m<sup>2</sup>.sr.μm). Considerações posteriores, como por exemplo características difusivas, permitem a simplificação do equacionamento.

As trocas de energia radiativa podem ser consideradas como ocorrendo entre todos os corpos presentes dentro da câmara de combustão, isso inclui as paredes e as partículas sólidas, que neste trabalho foram consideradas como corpos negros. Assim, a radiação emitida de um ponto inicial tem sua intensidade alterada ao longo de um caminho e esta pode ser expressa de forma ampla por:

$$\begin{aligned} \frac{dI_\nu(r, s)}{dS} = & -(K_{av} + K_{sv}).I_\nu(r, s) + K_{av}I_b(\nu, T) \\ & + \frac{K_{sv}}{4\pi} \int_{4\pi} dI_\nu(r, s')\Phi(s, s')d\Omega' + \dot{S} \end{aligned} \quad (2.56)$$

onde  $\nu$  é a frequência ou número de onda,  $r$  e  $s$  são os vetores posição e direção respectivamente. O termo  $S$  é a distância do caminho percorrido,  $K_{av}$  é o coeficiente de absorção do meio e  $K_{sv}$  o coeficiente de espalhamento. A intensidade de emissão de corpo negro é designada por  $I_b$ , enquanto  $I_\nu$  representa a intensidade de radiação espectral, ambas

apresentadas em  $[W/(m^2 \cdot sr \cdot \mu m)]$ , e  $T$  é a temperatura local absoluta, dada em [K]. O termo  $\Omega$  representa o ângulo sólido e o termo  $\Phi$  é a função de fase para o espalhamento. Tem-se finalmente o termo fonte representado por  $\dot{S}$ , dado em  $[W/(m^2 \cdot \mu m)]$ .

Para resolver o problema central da intensidade da radiação que sai de um ponto inicial até o final de um percurso definido, adota-se como condição de contorno a parede da câmara como uma superfície opaca, com emissão e reflexão difusas.

### 2.6.2 DTRM – Discrete Transfer Radiation Model

Existem vários métodos de resolução da equação de transferência de calor por radiação, RTE (*Radiation Transfer Equation*), sob o ponto de vista espacial da transferência de calor. Entretanto não há um método que apresente bons resultados em todas as aplicações. Este trabalho utilizou o modelo *Discrete Transfer Radiation Model* - DTRM segundo Carvalho et al., 1991, onde a variação da intensidade é calculada através de linhas do ponto de origem até o destino. Apesar da natureza isotrópica da radiação, a discretização do ângulo sólido em 16 ângulos discretos torna resolução numérica computacional simplificada, pois a equação é resolvida apenas para cada ângulo, em todos os volumes finitos que compõem a malha. A utilização do método tem apresentado bons resultados quando observadas suas limitações, como relatado por Filkoski, 2010.

A equação resolvida para cada raio é uma simplificação da Equação 2.56, e quando leva-se em conta o espalhamento, este é considerado isotrópico, permitindo a simplificação da equação por:

$$\frac{dI_v(r, s)}{dS} = -(K_{av} + K_{sv}) \cdot I_v(r, s) + K_{av} I_b(v, T) + \frac{K_{SV}}{4\pi} \int_{4\pi} I_V(r, s') d\Omega' + \dot{S} \quad (2.57)$$

Após a integração na banda espectral, a RTE pode ser escrita como:

$$\frac{dI(r, s)}{dS} = \frac{K_a \sigma T^4}{\pi} - K_a I(r, s) + S'' \quad (2.58)$$

onde  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann ( $5,672 \times 10^{-8} W/m^2 K^4$ ),  $r$  é o vetor posição,  $S$  é o vetor direção, e  $S''$  é o termo fonte, onde pode ser considerada a participação das partículas que geram o espalhamento. Assim, pode-se definir a variação na intensidade de radiação como sendo a diferença entre o ganho ocasionado pela emissão e a atenuação devido à

absorção do meio de acordo Siegel e Howell, 2002. O coeficiente  $K_a$  pode ser determinado de diversas formas. Este trabalho aplica o método WSGG – *Weighted Sum of Gray Gases* segundo Hottel e Sarofim, 1967, detalhado a seguir.

### 2.6.3 Modelo de Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza - WSGG

Tomando como exemplo um gás participante, com temperatura constante e uma trajetória conhecida, sendo atravessado por um fluxo de calor radiativo, pode-se definir sua emitância direcional total,  $\varepsilon_g$ , como sendo a razão entre a energia radiante emitida pelo gás na direção da trajetória, e a energia que seria emitida por um corpo negro à mesma temperatura. Este parâmetro apresenta forte variação em função do comprimento de onda, como pode ser analisado na Figura 2.7, que apresenta o comportamento da absorptância do CO<sub>2</sub>.

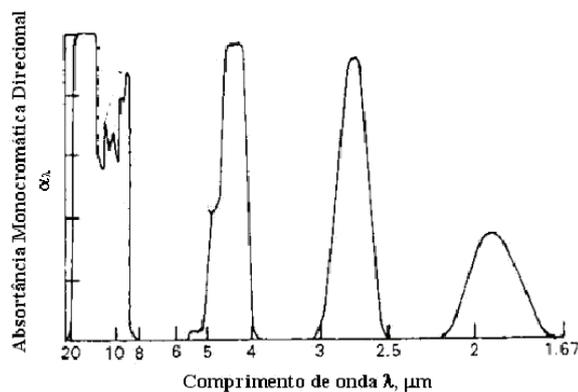


Figura 2.7 - Comportamento da absorptância em função do comprimento de onda no dióxido de carbono [Siegel e Howell, 2002].

O modelo WSGG foi desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967, e propõem a substituição da variação espectral do coeficiente de absorção, por um número limitado de gases cinza. Considerando um percurso  $S$ , pode-se relacionar dados experimentais com um equacionamento, como segue:

$$\varepsilon_W(pS) = \sum_{j=0}^{N_G} a_j(T)(1 - e^{-K_j pS}) \quad (2.59)$$

onde  $K_j$  é o coeficiente de absorção e  $a_j$  é o coeficiente de ponderação correspondentes ao  $j$ -ésimo gás cinza, e  $N_G$  é o número de gases cinzas considerados.  $\varepsilon_W$  é a emitância total do gás.

Pode-se definir o coeficiente de ponderação  $a_j$ , como a fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza  $K_j$ . Estes coeficientes foram determinados, com sucesso, por Smith et al., 1982, através de polinômios da forma:

$$a_j(T) = \sum_{k=0}^k b_{j,k} T^{k-1} \quad (2.60)$$

onde  $j$  o número do gás cinza e  $k - 1$  o grau do polinômio.

Com o modelo WSGG, a ETR, Equação 2.56, fica da seguinte forma, segundo Centeno, 2015. Assim,

$$\frac{dl_j}{dS} = -k_j l_j + k_j a_j(T) I_{CN}(T) \quad (2.61)$$

com  $j$  variando de 0 até 3.

#### 2.6.4 Modelo WSGG - Coeficientes de Dorigon

Dorigon et al., 2013 propuseram novos coeficientes de ponderação para o modelo WSGG em atualização aos de Smith et al., 1982, realizando ajustes das curvas de emitância total em relação às calculadas pelo método de integração LBL (*line-by-line*), utilizando as linhas espectrais obtidas pela base de dados espectrais Hitemp 2010 e Rothman et al., 2010, que é a versão mais recente da base de dados espectrais, além de considerar temperaturas da ordem de 1000K, mais adequadas ao problema de combustão. Foram utilizados quatro gases cinzas ( $N_G = 4$ ). Os coeficientes de ponderação propostos por Dorigon et al., 2013, utilizados no presente trabalho, são apresentados na Tabela 2.1. As pressões parciais de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  foram compensadas de forma dinâmica nas equações de cada coeficiente.

Tabela 2.1 - Coeficientes WSGG de [Dorigon et al., 2013]

j	$K_{g,j}$ , [m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup> ]	$b_{g,j,1} \times 10^1$	$b_{g,j,2} \times 10^1$ [K <sup>-1</sup> ]	$b_{g,j,3} \times 10^7$ [K <sup>-2</sup> ]	$b_{g,j,4} \times 10^{11}$ [K <sup>-3</sup> ]	$b_{g,j,5} \times 10^{14}$ [K <sup>-4</sup> ]
1	0,192	0,5617	7,8440	-8,5630	4,2460	-7,4400
2	1,719	1,4260	1,7950	-0,1077	-0,6972	1,7740
3	11,370	1,3620	2,5740	-3,7110	1,5750	-2,2670
4	111,016	1,2220	-0,2327	-0,7492	0,4275	-0,6608

### 2.6.5 Modelo de gás cinza - GC

No modelo espectral de gás cinza (GC), considera-se que o coeficiente de absorção  $K_a$  da Equação 2.56 seja independente do número de onda, podendo assumir um valor constante ou em função da temperatura e composição do meio de acordo com Centeno, 2014. No presente trabalho, foi considerada a variação de  $K_a$  em função da temperatura e composição dos gases. Este modelo é um dos mais simples e apresenta limitações, já que para uma espécie química gasosa o coeficiente de absorção sofre grande variação, em função do comprimento de onda. Entretanto trata-se de um modelo muito difundido que pode ser útil em várias aplicações de engenharia, e que reduz significativamente o esforço computacional requerido.

Com o modelo de GC, a ETR, Equação 2.56, fica da seguinte forma, segundo Centeno, 2014.

$$\frac{dl}{dS} = -kl + kl_{CN}(T) \quad (2.62)$$

O coeficiente de absorção,  $K_a$ , é obtido para cada gás participante em separado. No caso de uma mistura de gases, o coeficiente de absorção total da mistura é dado pela soma dos coeficientes de absorção individuais, conforme

$$K_{n,g} = p_{g1}k_{n,p,g1} + p_{g2}k_{n,p,g2} + \dots \quad (2.63)$$

onde  $K_{n,g}$  é o coeficiente de absorção total da mistura gasosa, em  $\text{cm}^{-1}$  e  $p$  é a pressão parcial.

### 2.6.6 Radiação devido a fuligem

A modelagem da transferência de calor radiativa em misturas de gases com fuligem (*soot*) vem sendo estudada, e diversos coeficientes foram determinados por diversos autores como Taylor e Foster, 1975, Makhviladze et al., 1999, entre outros. Alguns estudos adotaram para a fuligem os mesmos coeficientes e ponderações dos gases em questão, para todas as temperaturas. Esta consideração, apesar de reduzir o esforço computacional, pode introduzir erros significativos, uma vez que os coeficientes para os gases e para a fuligem possuem dependências distintas de acordo com Felske e Charalamlos, 1982.

Neste trabalho realizou-se a modelagem dos gases separadamente da fuligem, integrando os coeficientes dentro do WSGG. Para misturas de gases e fuligem, o número total

de gases cinzas é determinado pela combinação de cada gás cinza original,  $N_{g,j}$ , com os gases cinzas da fuligem,  $N_{s,j}$ . Assim o número total de gases cinza será  $N_{total} = (N_g + 1) \times N_s$ , onde o número um corresponde ao gás relativo à janela transparente. A modelagem completa possui, portanto, dez gases cinza. Os coeficientes de absorção final da mistura são calculados por:

$$k_{n,m} = k_{g,n} + k_{s,m} \quad (2.64)$$

e os coeficientes de ponderação são obtidos por:

$$a_{n,m} = a_{g,n} \times a_{s,m} \quad (2.65)$$

sendo  $(n = 0, \dots, k_g)$  e  $(m = 0, \dots, k_s)$ . Os subscritos  $g$  correspondem aos gases originais do WSGG,  $s$  refere-se à fuligem, e o subscrito  $j$  é a integração final das combinações. Os coeficientes adotados para a fuligem, seguiram os resultados obtidos por Cassol et al., 2014, e são apresentados na Tabela 2.2. Observa-se que para a fuligem há apenas dois gases cinzas.

Tabela 2.2 - Coeficientes WSGG para fuligem [Cassol et al., 2014].

$j$	$K_{g,j}$ , [m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup> ]	$b_{g,j,1} \times 10^1$	$b_{g,j,2} \times 10^1$ [K <sup>-1</sup> ]	$b_{g,j,3} \times 10^7$ [K <sup>-2</sup> ]	$b_{g,j,4} \times 10^{11}$ [K <sup>-3</sup> ]	$b_{g,j,5} \times 10^{14}$ [K <sup>-4</sup> ]
1	22.313,49	0,95552	-1,431	9,871	-3,390	4,555
2	466.624,8	0,08010	1,290	-7,874	2,322	-3,084

A motivação para o uso de dois gases cinzas para descrever a fuligem é de ordem computacional, uma vez que mais gases cinza deixariam o cálculo mais trabalhoso e com tempo computacional elevado.

Na Figura 2.7 pode-se observar intervalos da curva em que a absorptância apresenta valores nulos. Estes intervalos são também conhecidos como janelas transparentes. No caso de misturas puras de gases, as janelas transparentes não contribuem para o processo, mas em uma mistura de gases e fuligem deve-se considerar a emissão e a absorção da fuligem nas regiões espectrais correspondentes de acordo com Centeno, 2014. A inclusão do efeito da janela transparente pode ser feita através da inclusão de um gás cinza adicional com coeficiente de absorção nulo,  $k_{g,0} = 0$ . O coeficiente de ponderação pode ser calculado por:

$$a_{g,0}(T) = 1 - \sum_{k=1}^{Ng} a_{g,j} \quad (2.66)$$

As partículas sólidas de carvão bruto, cinzas e carbono residual foram consideradas esféricas, homogêneas, e configuradas como corpos opacos e negros com emissividade igual à 1. A correlação de transferência de calor entre o escoamento da mistura gasosa e as partículas sólidas adotada foi a de Hanz-Marshall.

## 2.7 Burnout

O *burnout* dos combustíveis simulados no reator, foi calculado pelo método *ashtracer*, o qual é um balanço de massa entre a quantidade de cinzas que entra e que sai do reator, conforme a Equação 2.67. Assim,

$$Burnout \text{ (\%)} = \left[ 1 - \left( \frac{Ash_{Comb}}{100 - Ash_{Comb}} \right) \left( \frac{100 - Ash_{Res}}{Ash_{Res}} \right) \right] \cdot 100 \quad (2.67)$$

O termo  $Ash_{comb}$  se refere ao teor de cinzas presente no combustível, em base seca, e o termo  $Ash_{Res}$  se refere ao teor de cinzas presentes no resíduo da combustão, recolhido pela sonda em cada ponto de coleta.

## 2.8 Limitações do modelo

Quando se fala em modelagem, assume-se que exista alguma abstração do sistema físico real, ou seja, que o modelo tenta representar a realidade com alguma limitação, o que certamente pode gerar falhas em algumas situações de solicitação. Contudo, deseja-se que a precisão do modelo em relação à realidade seja maximizada. Assim, avaliando o modelo numérico apresentado na Seção 2 e utilizado no presente trabalho, constata-se algumas limitações, como as listadas abaixo:

1. As partículas não são necessariamente esféricas, como considerado no modelo.
2. De fato, a hipótese de corpo negro é uma idealização para o comportamento das partículas sólidas no domínio;

3. O domínio não é realmente unidimensional e tem-se outros componentes escalares do vetor velocidade no escoamento além da velocidade axial;

4. O modelo de combustão dos voláteis e do carbono residual (*Char*) é simplificado, baseado em mecanismos globais;

### 3 METODOLOGIA

O presente capítulo apresenta as características do reator de queda livre utilizado, o método numérico adotado da solução do problema, o estudo de convergência de malha, a validação do modelo implementado por comparação com dados experimentais de Wang et al., 2014 e a análise de qual modelo de escoamento é mais adequado para a solução do problema.

#### 3.1 Características do Drop Tube Furnace (DTF)

O forno de queda livre, ou ainda a fornalha tubular de queda, conhecido em inglês como *Drop Tube Furnace* (DTF) é um equipamento laboratorial para estudos de combustão de combustíveis sólidos, no qual as partículas são continuamente alimentadas num tubo vertical e transportadas por uma corrente de gás segundo Souza e Santos, 2004. O DTF consiste em um reator cilíndrico vertical, com aquecimento através de resistências elétricas em que as partículas de combustíveis sólidos são continuamente alimentadas juntamente com um fluxo gasoso com velocidade inferior à velocidade terminal. As partículas se deslocam dentro do forno e podem ser coletadas em diferentes pontos, correspondendo a diferentes tempos de residência. No ponto de coleta, as partículas são arrefecidas com um fluxo de nitrogênio a fim de cessar as reações. Para estudos de queima, o gás pode ser ar atmosférico, produtos de combustão ou outras misturas com concentração controlada de oxigênio, enquanto que em estudos de pirólise as partículas podem ser introduzidas em uma atmosfera de nitrogênio. O DTF é capaz de simular em laboratório as condições de trabalho de processos de combustão em grande escala, tais como altas temperaturas, altas taxas de aquecimento (na ordem de  $10^4$  °C/s) e tempos de residência na ordem de centésimos à décimos de segundo. Os fornos podem ser configurados para produzir resultados similares àqueles observados em queimadores reais por meio do ajuste de parâmetros operacionais como temperatura, velocidade do gás de arraste, tempo de residência da partícula e excesso de ar segundo Zimmer, 2012. Através dos experimentos em fornos DTF pode-se caracterizar a eficiência de queima de combustíveis sólidos, o processo de liberação de voláteis, as emissões geradas e deposição de cinzas em superfícies. Com o auxílio de modelagem pode-se ainda extrair os parâmetros cinéticos de combustão e volatilização. Adicionalmente pode-se estudar

os efeitos cinéticos de um determinado gás controlando-se a composição da atmosfera ou estudar os efeitos de interação de misturas de combustíveis diferentes.

Os sistemas DTF são relativamente baratos de operar e podem gerar múltiplos conjuntos de dados em um período curto de tempo. A mais importante habilidade destes sistemas é a de simular as condições de operação de um processo de combustão de grande escala, especialmente em altas temperaturas e taxas de aquecimento. Os DTFs podem ser configurados usando os parâmetros chave operacionais para produzir resultados similares àqueles observados em queimadores reais. Os parâmetros chave incluem temperatura do gás, tempo de residência da partícula, excesso de ar, taxas de aquecimento, e temperaturas superficiais das partículas de acordo com Zimmer, 2012.

Segundo Wang et al., 2014, o DTF do Instituto Superior Técnico de Lisboa, no qual se baseou o estudo deste trabalho, opera em temperatura máxima de 1100 °C. A câmara de combustão é cilíndrica, com diâmetro interno de 50 mm para experimentos de combustão em ar atmosférico. Ambos os cilindros têm 1300 mm de comprimento. A temperatura da parede do forno é continuamente monitorada por oito termopares tipo K, uniformemente distribuídos ao longo da câmara de combustão. Um injetor resfriado a água transporta partículas de combustível sólido através de um duto central junto com o fluido de transporte. Em uma passagem concêntrica encontra uma vazão secundária de oxidante. O dosador volumétrico do tipo rosca dupla transfere combustível sólido pulverizado para o injetor resfriado, de onde o combustível é inserido na câmara de combustão. As partículas são recolhidas dentro da câmara por uma sonda móvel resfriada a água e nitrogênio, que cessa a combustão no momento em que partículas adentram a mesma.

A Figura 3.1 apresenta esquematicamente o DTF utilizado e as principais condições de contorno adotadas para a construção do modelo no CFX<sup>®</sup>. O sistema é constituído por uma unidade de alimentação de combustível, pelo Reator e por uma unidade de captura de partículas.

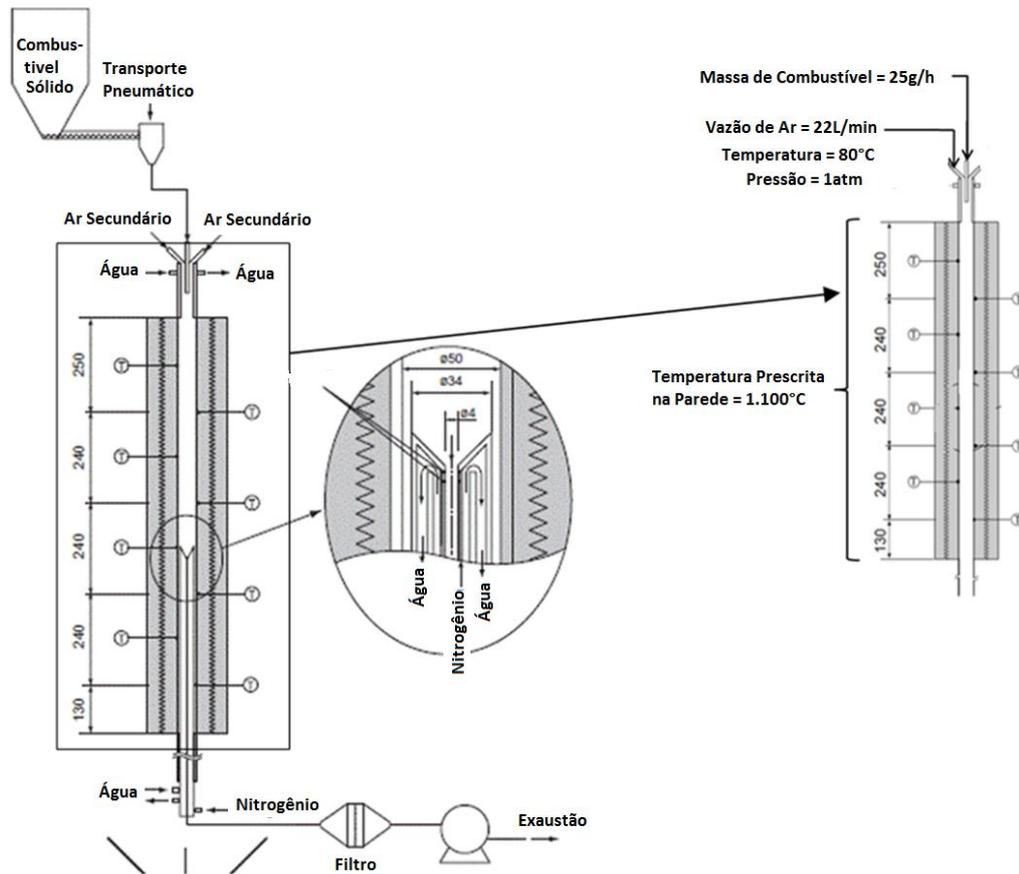


Figura 3.1 - *Drop Tube Furnace* [Adaptado de Wang et al., 2014].

### 3.1.1 Geometria

O *Drop Tube Furnace*, apresentado na Figura 3.1, é eletricamente aquecido com uma potência total de 5.600 W, é formado por um tubo de cerâmica de 1.300 mm de comprimento e 50 mm de diâmetro interno. As resistências elétricas são acionadas por oito controladores PID que acionam as resistências de acordo com as temperaturas lidas por oito termopares distribuídos uniformemente ao longo do DTF.

A injeção da mistura de carvão pulverizado, é feita pela parte superior do reator. O sistema de alimentação é composto por dois medidores de vazão, um depósito, um alimentador de parafuso ligado a um motor de velocidade variável, um agitador e por um injetor arrefecido a água.

A alimentação de partículas consiste em um duto que injeta o combustível, impulsionado por ar comprimido, até a entrada do forno na extremidade superior do DTF. A

parte desse dispositivo de injeção situada fora do forno é dotada de uma camisa d'água a fim de promover a alimentação de combustível a uma temperatura conhecida.

Abaixo do dispositivo de injeção, a combustão ocorre ao longo do comprimento do forno. Pelo interior do DTF é posicionada uma sonda móvel e refrigerada, que coleta partículas e gases nos locais desejados. Uma estrutura de suporte garante a fixação da sonda durante o procedimento de coleta. Nitrogênio é adicionado ao processo para resfriar as partículas quando entram na sonda. A bomba a vácuo é ligada na saída da sonda por mangueiras, tendo o filtro de quartzo localizado num equipamento de suporte entre a saída da sonda e a bomba. O filtro retém as partículas, enquanto que os gases são direcionados para análise, ou descarregados na atmosfera. Na saída da bomba é colocado um tubo com um encaixe para o analisador de gases, que coleta o gás liberado pela combustão, juntamente com o nitrogênio e o gás de arraste e procede a sua análise.

### **3.2 Método numérico computacional**

Todas as equações da modelagem matemática são resolvidas pelo Método dos Volumes Finitos (MVF) desenvolvido por Patankar, 1980, método este utilizado pela maioria dos *softwares* comerciais, tais como o CFX<sup>®</sup> e o Fluent<sup>®</sup> da Ansys<sup>®</sup>, por exemplo. O MVF realiza um balanço de conservação da propriedade de cada volume elementar da malha computacional para obter a correspondente equação discreta, satisfazendo a conservação da propriedade a nível dos volumes elementares.

A Figura 3.2 resume os modelos aplicados para a solução do problema para queima de carvão. Nesta figura apresenta-se um diagrama esquemáticos do modelo numérico desenvolvido para representar o experimento no DTF. No modelo são considerados como constantes os dados de entrada de vazão de combustível e ar, além de suas propriedades elementares, temperatura, velocidade e tamanho das partículas sólidas.

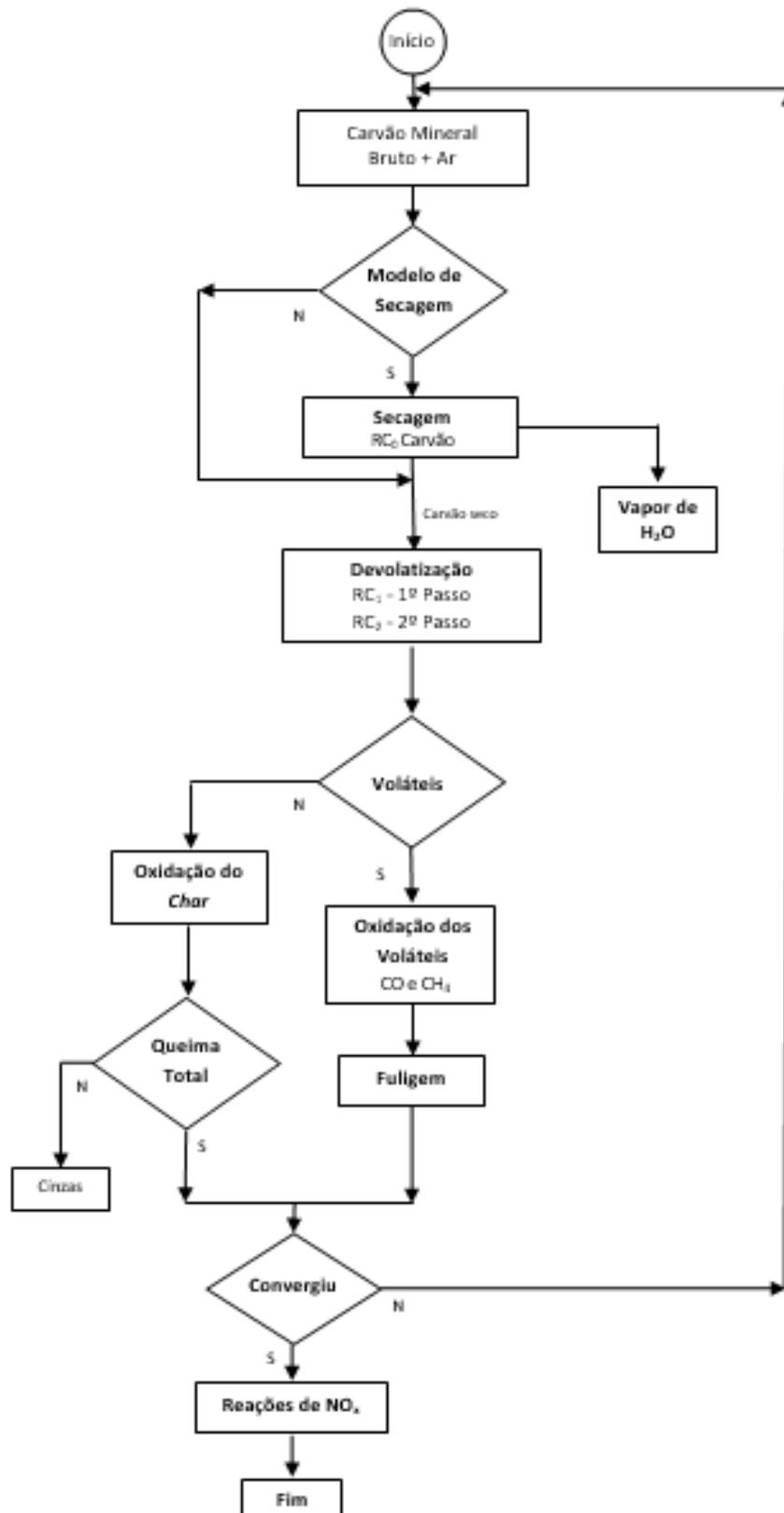


Figura 3.2 - Arranjo esquemático dos modelos utilizados.

O arranjo esquemático possibilita visualizar a sequência aplicada na solução do problema, iniciando com a identificação do tipo de combustível aplicado. Na fase seguinte, aplica-se o modelo de secagem do combustível, o qual tem como saída vapor d'água e combustível seco. Após esta fase, as partículas de carvão seguem para as etapas de devolatilização, oxidação dos voláteis e carbono residual, formação e oxidação de fuligem. Após o processamento e convergência dos modelos de secagem, devolatilização, oxidação, formação e combustão de fuligem, emprega-se o modelo de cálculo de formação de NO<sub>x</sub>, no que chamamos de pós processamento.

### 3.3 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  $10^{-6}$  para todos resíduos, desta forma, buscando-se atingir uma convergência satisfatória.

### 3.4 Domínio de investigação e malha computacional

Uma parte do aparato que compõem o DTF foi assumida para o estudo, a qual compreende o tubo de reação, e uma malha computacional foi desenvolvida no *software* ICEM CFD<sup>®</sup>, programa integrante do pacote ANSYS<sup>®</sup>. A discretização da geometria foi realizada com a implementação de volumes tetraédricos no núcleo do domínio e volumes prismáticos na região próxima das paredes do reator. Para a malha, foram empregadas 860 mil células para caracterizar o domínio computacional, estendendo-se de 0 a 1,3 metros na direção axial e de 0 a 0,05 metros na direção radial, representando o tubo do reator.

A Figura 3.3 a seguir apresenta a malha desenvolvida para este estudo em corte longitudinal, mostrando a discretização dos volumes de controle prismáticos próximos das paredes na região de entrada.

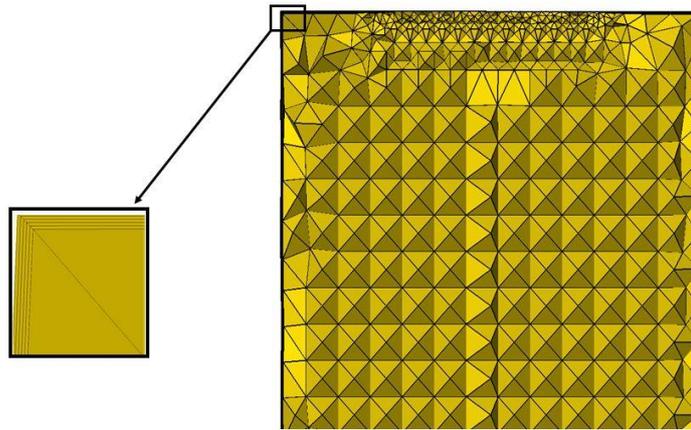


Figura 3.3 - Malha computacional gerada no *software* ICEM CFD<sup>®</sup> em corte longitudinal, mostrando a discretização dos elementos volumétricos na região de entrada.

A Figura 3.4 mostra a geometria do caso em estudo implementada no *software* Ansys CFX<sup>®</sup>, no qual, foi realizada a especificação das condições de contorno, valores iniciais e parâmetros de solução.

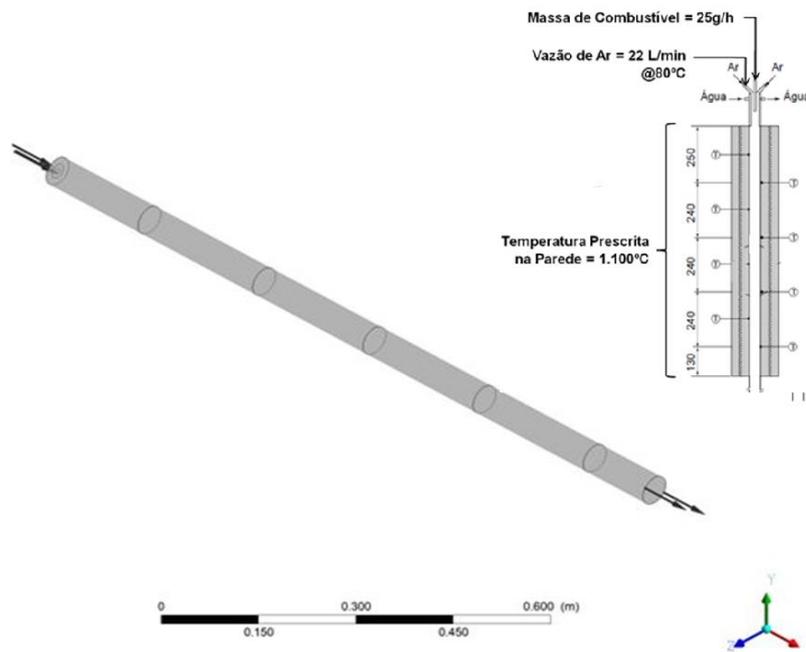


Figura 3.4 - Vista isométrica no *software* Ansys CFX.

### 3.4.1 Estudo de qualidade da malha

Simulações numéricas computacionais exigem uma análise cuidadosa da malha construída, de forma a garantir que ela represente da forma mais fiel possível o problema

estudado. Esta análise depende do conhecimento e da experiência do responsável pela simulação, e existem métodos para se avaliar uma malha. O estudo de qualidade de malha é um destes métodos, que visa garantir a escolha correta da malha a ser simulada, encontrando-se o equilíbrio entre refinamento e o esforço computacional. O método consiste em construir malhas mais e menos refinadas no entorno de uma malha pré-definida. Entende-se por refinamento a diminuição das dimensões dos volumes trabalhados, ou seja, maior quantidade de volumes. A análise é realizada sobre alguma variável previamente escolhida, e os resultados devem ser comparados entre si, escolhendo-se a malha que garanta resultados constantes, independentemente de posterior refinamento.

A Tabela 3.1 apresenta os resultados obtidos para a temperatura, frações molares de CO<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> na linha axial do reator, empregando diferentes graus de refinamento da malha. Uma vez que estas variáveis reúnem características do escoamento, turbulência, transferência de calor e cinética química, elas foram escolhidas por serem variáveis chave para as simulações, sendo utilizadas para o estudo de convergência de malha.

Tabela 3.1 - Temperatura e frações mássicas médias para O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> na saída do reator.

Validação da Malha				
Malha	Volumes	T média [°C]	XO <sub>2</sub> médio	XCO <sub>2</sub> médio
1	3,2E+06 (400 X 8000)	888,55	20,832%	2,4276%
2	8E+05 (200 X 4000)	888,57	20,835%	2,4326%
3	2E+05 (100 X 2000)	888,67	20,842%	2,4376%

Pode-se observar que o estudo de convergência de malha aqui apresentado baseia-se na duplicação do número de volumes em cada direção, conforme pode ser verificado na Tabela 3.1. Este estudo foi realizado com a comparação de três malhas, sendo a malha "1" a mais refinada, "2" a malha intermediária e a "3" a malha mais grosseira.

No presente estudo emprega-se a metodologia de análise de independência de malha proposta por Roache, 1994, e atualizada por Celik et al., 2008, que propôs um índice de convergência de malha (*GCI - Grid Convergence Index*) com o objetivo de reportar os resultados do estudo de convergência de malha de forma uniforme e ainda fornecer uma estimativa de erro relacionada com a convergência de malha da solução. Este CGI pode ser calculado com dois níveis de malha, entretanto, três níveis são recomendados a fim de estimar

a ordem de convergência e para verificar se os resultados estão dentro da faixa assintótica de convergência.

O GCI é uma estimativa do desvio percentual entre o resultado calculado e o valor assintótico que seria obtido com uma malha com resolução zero, ou seja, o GCI indica uma faixa de erro sobre o quanto distante a solução com uma determinada malha esta do valor assintótico. O GCI da malha mais refinada é definido como:

$$GCI_{12} = \frac{F_s |\varepsilon_{12}|}{(r^p - 1)} \quad (3.1)$$

sendo  $F_s$  o fator de segurança. Roache, 1994 recomendou que o  $F_s$  igual a 3 para comparação com duas malhas e  $F_s=1,25$  para comparações com três malhas. O erro relativo  $\varepsilon_{12}$  é definido como:

$$\varepsilon_{12} = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (3.2)$$

onde  $f_1$  é a solução obtida para a malha mais refinada, e  $f_2$  a solução para a malha intermediária. Analogamente, é possível determinar o índice de convergência de malha para a malha 2,  $GCI_{23}$ , empregando-se as Equações 3.1 e 3.2. Na Equação 3.1  $p$  é a ordem de convergência, a qual pode ser diretamente obtida a partir de três soluções usando um fator de refinamento da malha  $r$  constante. Assim,

$$p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln r} \quad (3.3)$$

No presente trabalho adota-se  $r=2$ , ou seja, a malha mais grosseira, identificada como malha 3 na Tabela 3.1, tem a metade da quantidade de volumes em cada direção que a malha intermediária, malha 2, da mesma tabela, sendo que esta possui a metade da quantidade de volumes em cada direção que a malha mais refinada.

Após a determinação dos índices de convergência de malha  $GCI_{12}$  e  $GCI_{23}$ , pode-se verificar a convergência da solução para a faixa assintótica através de:

$$x = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (3.4)$$

se o resultado da Equação 3.4 for próximo a um, indicam que as soluções estão dentro da faixa assintótica de convergência.

A Tabela 3.2 apresenta os resultados do estudo de convergência das malhas. Ressalta-se que os valores de  $GCI_{12}$ ,  $GCI_{23}$  e  $X$  devem ser calculados separadamente para cada variável chave que foi selecionada para o estudo de convergência de malha. De acordo com os dados calculados e apresentados na Tabela 3.2, o valor do  $GCI_{12}$  apresenta níveis adequados de precisão para todas as variáveis, além do valor de  $X$  ser muito próximo a um, indicando que os resultados estão dentro da faixa assintótica.

Tabela 3.2 - Índice de convergência de malha para as variáveis utilizadas.

	GCI		
	$T_{\text{médio}} [^{\circ}\text{C}]$	$XO_2.\text{médio}$	$XCO_2.\text{médio}$
$GCI_{12} [\%]$	0,0007	0,0357	17,7586
$GCI_{23} [\%]$	0,0035	0,0634	17,7586
$X$	1,0000	1,1071	1,0147

A Figura 3.5 apresenta o gráfico da comparação das três malhas computacionais, utilizadas no estudo de convergência de malha, sendo representada a temperatura na linha de centro para as três simulações com as malhas testadas.

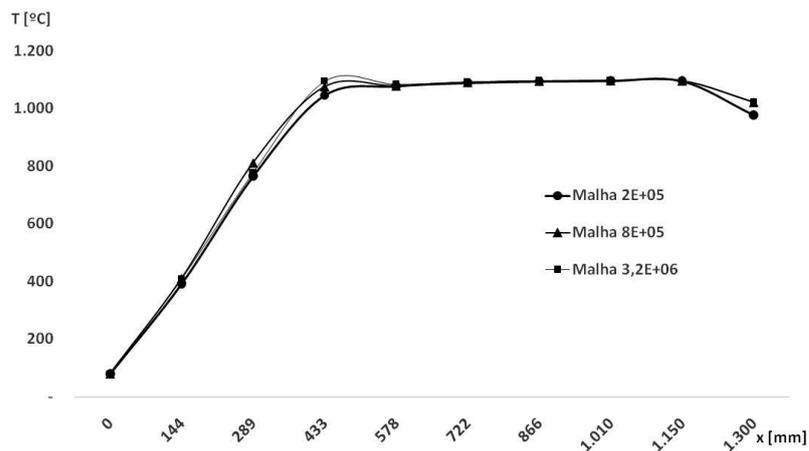


Figura 3.5 - Gráfico do teste de independência de malha

A abscissa descreve a posição vertical ao longo do reator, sendo o ponto zero localizado na entrada de ar e combustível. Observou-se que a região de maior diferença de resultado entre as malhas é na faixa de 0,28 a 0,58 m, sendo esta a região onde ocorrem as

reações de combustão. Mesmo nesta região observa-se que a diferença entre os resultados tende a diminuir, à medida que se refina a malha. Esta tendência à estabilização dos resultados motivou a escolha da malha com  $8,5 \times 10^5$  volumes, a qual apresenta bons resultados, com tempo de processamento otimizado, em comparação as malhas mais refinadas. Simulações com malhas mais refinadas não puderam ser realizadas devido à limitação computacional.

Considerando que as simulações são feitas em um computador Desktop, com processador INTEL XEON CPU ES-1650 3,5 GHz e 24,0 GB de memória, os custos computacionais para a malha escolhida (2) foram de aproximadamente 108 segundos por iteração. São necessárias aproximadamente 800 iterações para a convergência do problema, que corresponde a aproximadamente 36 horas de processamento, o qual é aceitável para os propósitos deste trabalho.

### **3.5 Dados de entrada e combustível**

Para a simulação e análise dos resultados provenientes da simulação com o DTF, informações sobre a relação de ar/combustível são de extrema relevância.

A combustão é completa quando todo o carbono presente no combustível se oxida e forma  $\text{CO}_2$ , todo o hidrogênio forma  $\text{H}_2\text{O}$  e todo o enxofre forma  $\text{SO}_2$ , assim como outros elementos são completamente oxidados. Quando estas condições não são atendidas, surgem nos gases de combustão de espécies intermediárias, como  $\text{CO}$  e  $\text{NO}$ , pelo fato da combustão ser incompleta.

Pela conservação de massa, pode-se afirmar que a massa dos produtos é igual a massa dos reagentes, de modo que a variação ocorre em termos de número de mols.

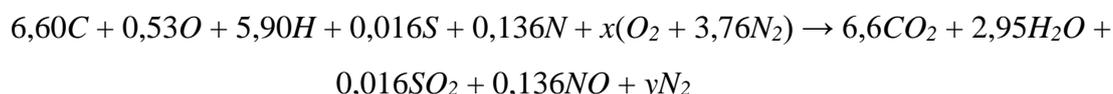
A partir da análise elementar é possível determinar a quantidade de ar necessária para que ocorra a combustão completa de cada material. Neste estudo, esses cálculos foram feitos considerando-se a combustão de carvão betuminoso, considerando o ar nas condições atmosféricas. A Tabela 3.3 demonstra a análise elementar e a massa atômica do carvão utilizado no presente trabalho.

Tabela 3.3 - Composição elementar e imediata do carvão betuminoso

Composição elementar - Base úmida [%]		Massa atômica	Mol/grama de combustível
Carbono	79,3	12,01	6,60
Oxigênio	8,4	15,99	0,53
Hidrogênio	5,9	1,00	5,90
Enxofre	0,5	32,00	0,016
Nitrogênio	1,9	14,00	0,136
Outros (Umidade e cinza)	4,0		
Composição imediata - Base úmida [%]			
Voláteis	44,6		
Carbono fixo	51,4		
Umidade	1,7		
Cinza	2,3		

Fonte: Wang et al., 2014.

A composição química varia entre os diferentes combustíveis sólidos. Os coeficientes estequiométricos são normalmente números fracionários que são obtidos com base na análise elementar dos materiais. Desta forma, a equação química balanceada para o caso do carvão, pode ser descrita conforme abaixo. Assim,



A relação de ar-combustível em massa em combustão estequiométrica é dada:

$$\frac{1082,98}{96} = 11,28$$

Desta forma, a proporção estequiométrica (massa/massa) entre ar/combustível é dada por: 11,28:1. Adotando o excesso de ar de 20%, a proporção de ar combustível é 1,20 vezes a proporção estequiométrica, ou seja, 13,53:1. Assim, considerando a alimentação de 25gramas/hora de carvão, a massa de ar necessária 324,89g/h, ou 0,32489kg/h.

Como a densidade do ar seco é igual a  $1,2\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ , a vazão necessária será de 270,74L/h ou 4,51L/min. Portanto, para o carvão betuminoso, com alimentação de 25g/h a vazão de ar necessária para combustão estequiométrica é de 3,76L/min e de 4,51L/min,

considerando um excesso de ar de 20%. Nos experimentos realizados por Wang et al., 2014, foi adotada uma vazão de ar de 22L/min, ou seja, um excesso de ar de 585%.

Vide que os dados de entrada para construção do modelo numérico tiveram como referência os experimentos produzidos por Wang et al., 2014, as condições de entrada foram prescritas conforme dados informados na Tabela 3.4 para os diferentes casos analisados.

Tabela 3.4 - Dados de entrada e condições de contorno no reator.

	<b>Carvão</b>
Carvão [g/h]	25
Vazão de ar seco [L/min]	22
Temperatura de entrada do ar [°C]	80
Temperatura das paredes [°C]	1.100
Emissividade das paredes	0,9
Velocidade de entrada do combustível [m/s]	0,74
Velocidade de entrada do ar [m/s]	0,74

De acordo com os dados de entrada utilizados nos experimentos e, a relação ar/combustível calculada no presente trabalho, a relação utilizada é 5,85 vezes superior se comparada a condição de combustão estequiométrica, ou seja, um excesso de ar de 585% para a condição com carvão.

A simulação da combustão do carvão foi conduzida no reator aquecido a uma temperatura de 1.100°C sobre as paredes do domínio. Considera-se que nas paredes aplicam-se as condições de não deslizamento e impermeabilidade. Para o modelo de turbulência consideram-se energia cinética turbulenta e sua dissipação como nulas nesta região do domínio.

As constantes cinéticas empregadas na secagem das partículas de carvão adotadas neste trabalho, ou seja, o fator pré-exponencial e a energia de ativação são mostradas respectivamente na Tabela 3.5.

Tabela 3.5 - Constantes cinéticas para as reações envolvendo o carvão.

<b>Reação</b>	<b>A</b>	<b>E [kJ/mol]</b>	<b>Referência</b>
$R_{c0}$	$4,58 \times 10^{12} [\text{kg}^{-2} \cdot \text{m}^6 \cdot \text{s}^{-1}]$	78,99	Xianchun et al., 2009
$R_{c1}$	$2,00 \times 10^9 [\text{s}^{-1}]$	160,00	Wang et al., 2014
$R_{c2}$	$2,00 \times 10^9 [\text{s}^{-1}]$	160,00	Wang et al., 2014

O tamanho das partículas de carvão foram modeladas considerando uma distribuição probabilística desenvolvida por Rosin-Rammler Brow, 1995 e, de acordo com Smart et al., 2010, com distribuição variando de 30a 300  $\mu\text{m}$ , sendo que aproximadamente 77,5% do fluxo total de partículas possuem diâmetro menor de 50 $\mu\text{m}$ , com um fator de dispersão de 5,78. Considerou-se que as partículas sejam esféricas e uniformemente distribuídas no orifício de entrada.

### 3.6 Escoamento no reator

A Figura 3.6 mostra a trajetória das partículas ao longo do reator a partir da entrada primária e secundária do DTF.

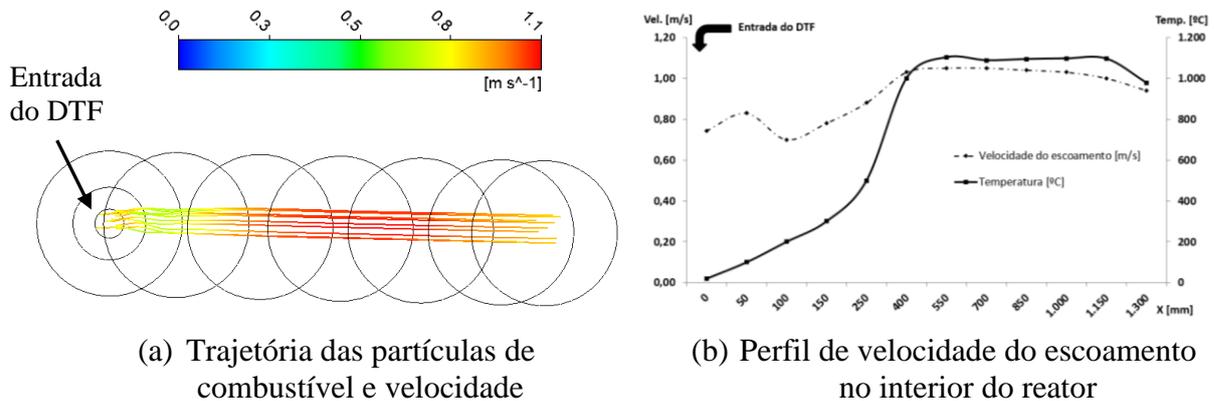


Figura 3.6 - Trajetória das partículas em função da velocidade no interior do reator.

É possível observar que o escoamento possui comportamento de trajetória linear, sem formação de recirculações na trajetória das partículas, que sofrem aceleração após os 120 mm da entrada do reator.

As partículas de combustível são introduzidas no interior do reator, com velocidade aproximada de 0,743m/s e sofrem leve desaceleração no início do reator, devido ao aumento da seção do escoamento. As partículas de combustível voltam a sofrer aceleração após a posição 120 mm da entrada, ocasionada pela expansão volumétrica do gases e aceleração da gravidade. A velocidade máxima é atingida aos 700mm da entrada, com velocidade do escoamento de 1,05 m/s.

Como ocorre o aquecimento do ar no interior no reator, provocado pelas paredes aquecidas e reações de combustão, as propriedades do ar que afetam o perfil do escoamento,

como a velocidade dos gases, massa específica e viscosidade, sofrem significativa variação, assim como número de Reynolds. A Figura 3.7 apresenta a variação do número de Reynolds e da temperatura no interior do DTF, sendo que a cota "zero" indica a entrada do reator.

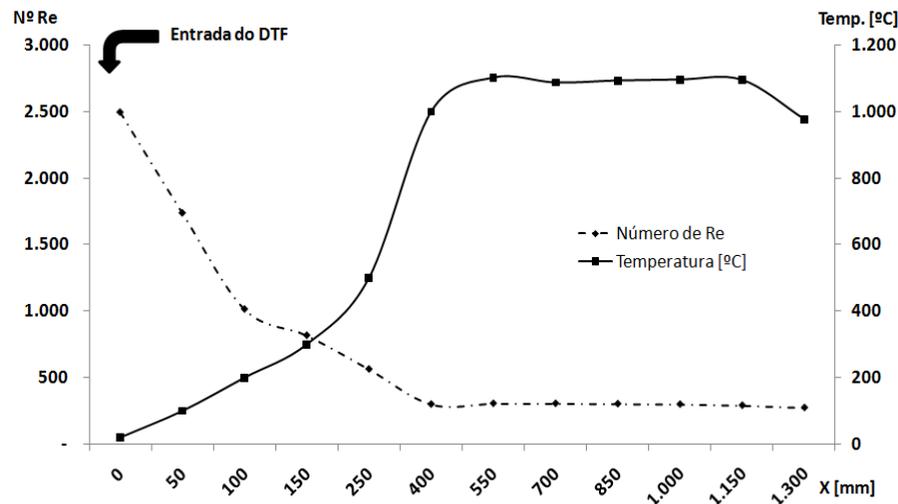


Figura 3.7 - Número de Reynolds e temperatura dos gases no reator.

Conforme observado na linha tracejada da Figura 3.7, o escoamento inicia-se em regime transitório na entrada do reator e torna-se laminar, após o aquecimento dos gases, permanecendo neste regime até o final do escoamento.

Mesmo com um escoamento sendo predominantemente laminar, o modelo numérico que obteve melhores resultados em comparação com os dados experimentais foi o modelo de turbulência  $k-\omega$ , conforme apresentado na Seção 3.8. Desta forma, foi aplicado em todas as simulações do presente trabalho.

### 3.7 Comparação com dados experimentais

O modelo de combustão aplicado neste estudo foi confrontado com os dados do experimento realizado em um DTF por Wang et al., 2014, observando-se o campo de temperaturas e taxas de queima das partículas (*burnout*). O mesmo autor realizou experimentos em um reator, utilizando carvão e diferentes biomassas, como: casca de arroz, ramos de pinheiro, palha de trigo, casca de café, bagaço de azeitona, caroço de pêssigo e derivados de resíduo urbano. O estudo incluiu trabalho experimental e numérico, utilizando-se o *software* Fluent<sup>®</sup> da Ansys<sup>®</sup> Inc., e teve como principal objetivo caracterizar os processos de

combustão e oxi-combustão em duas instalações distintas, especificamente em um reator tubular, usando oxidantes com diferentes composições em uma fornalha laboratorial. A configuração do modelo computacional incluiu: modelo de turbulência,  $k-\varepsilon$ , modelo de balanço de energia, modelo de transporte de espécies, modelo de fase discreta e Modelo de Ordenadas Discretas (DOM) para radiação térmica.

A Figura 3.8 apresenta os resultados medidos no experimento e nas simulações de Wang et al., 2014 para a distribuição de temperatura sobre a linha axial do reator em comparação com os resultados obtidos na simulação do presente trabalho para carvão.

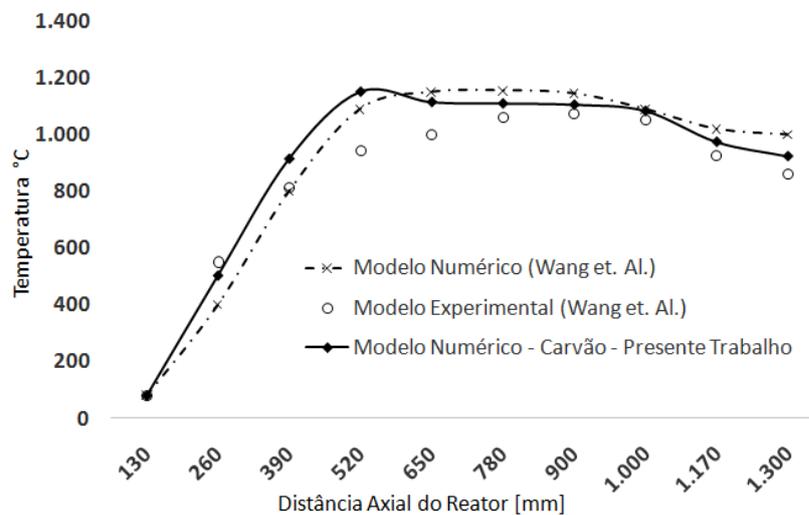


Figura 3.8 - Campo de temperatura na linha de centro do reator para carvão.

Os perfis de temperatura apresentam comportamentos similares e são caracterizados por um aumento inicial da temperatura que é bastante similar para todos os combustíveis sólidos e característica dos experimentos e simulações no DTF. Este aumento na temperatura resulta principalmente do aquecimento induzido do reator, além da devolatilização e combustão dos voláteis.

Analisando os resultados dos perfis de temperatura verifica-se boa concordância entre os resultados do presente trabalho e os resultados experimentais obtidos por Wang et al., 2014, atingindo temperaturas máximas de 1072°C no experimental e 1151 °C pelo método numérico, e temperaturas médias de 834,8 °C e 848,8 °C, respectivamente, para resultados experimentais e numéricos.

A Figura 3.9 apresenta a taxa de queima do carvão nas três situações analisadas para a validação do modelo, sendo os dados experimentais e numéricos de Wang et al., 2014 com os resultados obtidos no presente trabalho.

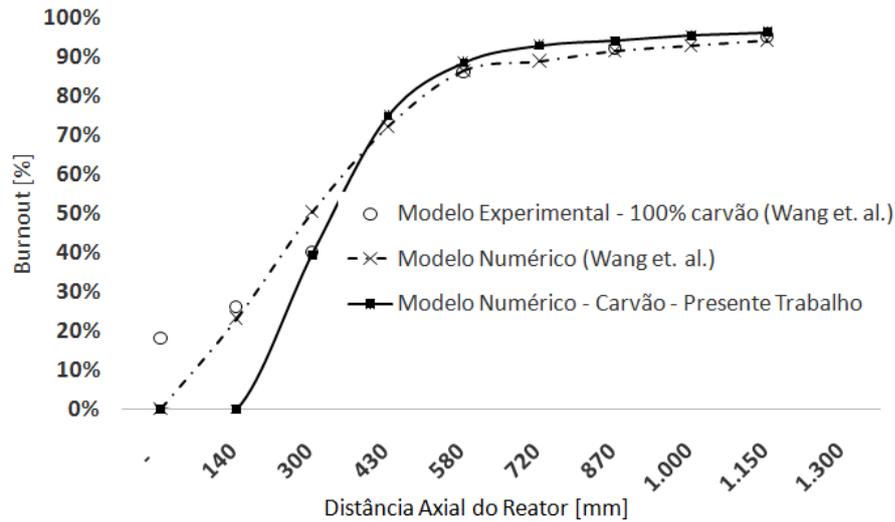


Figura 3.9 - Taxas de *burnout* na linha de centro do reator para carvão.

Observa-se que os modelos numéricos não representam a reação no início do reator, conforme verificado no experimento. O que justifica a taxa de *burnout* ficar inalterada nesta região de entrada do reator são as etapas de aquecimento e posterior secagem do combustível, antes do início da devolatilização e reações de oxidação.

O modelo desenvolvido no presente trabalho obteve resultados próximos aos dados de Wang et al., 2014, com desvio médio relativo de 1,65% perante os dados experimentais, enquanto o modelo numérico desenvolvido pelos mesmos autores apresentou desvio médio de 6,5%, quando comparados com os dados de temperatura. As principais divergências entre os modelos foram observadas na zona de combustão, localizadas entre 480 a 650 mm da entrada do reator. A provável razão para estas discrepâncias está associada com a dificuldades de instrumentação e medição experimental, enquanto que nas demais regiões do reator foram obtidos dados bem próximos aos dados experimentais. Visto que o modelo numérico do presente trabalho representou de forma similar a taxa de queima (*burnout*) e o comportamento da temperatura ao longo do reator, considerando-se assim que a modelagem computacional desenvolvida é representativa dos fenômenos que ocorrem no equipamento.

### 3.8 Modelo computacional

Os modelos foram baseados na solução das equações médias de Reynolds (RANS) fazendo-se o uso de médias ponderadas pela massa, médias de *Favre* de Freire et al., 2002, para a fase gasosa, considerando o modelo  $k-\omega$  para representar a turbulência do escoamento. A trajetória das partículas no escoamento é prevista por um modelo Lagrangeano, onde são realizados a partir dos campos de propriedades da fase gasosa os devidos balanços de massa, força e energia. Uma distribuição estatística é aplicada para injeção dos combustíveis no domínio de estudo, onde os parâmetros de injeção para o carvão são estimados pela distribuição de acordo com o critério de Rosin-Rammler.

Para prever o comportamento da combustão do reator, foi utilizado na modelagem computacional uma combinação dos seguintes modelos: *Eddy Dissipation Model* (EDM) de Magnussen e Hertzger, 1976 e o *Finite Rate Chemistry Model* (FRC) de Kuo, 2005, o chamado modelo de Eddy Breakup Arrhenius, amplamente utilizado na literatura de Nieckelle et al., 2002. O Modelo foi implementado na versão 19 do CFX<sup>®</sup>.

#### 3.8.1 Modelo de turbulência

Foram realizadas simulações com quatro modelos de turbulência para se escolher o mais adequado a ser utilizado: Laminar,  $k-\varepsilon$ ,  $k-\varepsilon$  RNG e  $k-\omega$ . A Figura 3.10 apresenta os resultados obtidos para cada modelo em comparação com os dados experimentais.

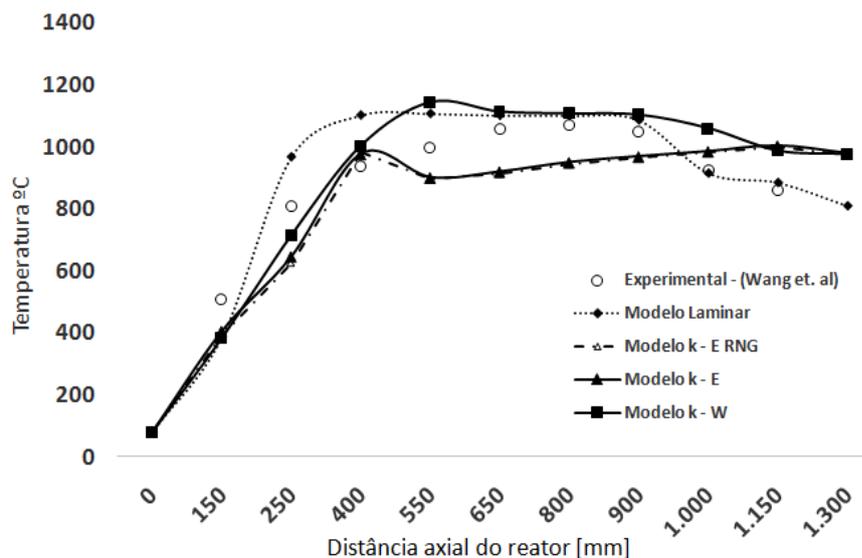


Figura 3.10 - Comparativo dos modelos de turbulência. Resultados para temperatura dos gases.

Os desvios médios obtidos para cada modelo foram os seguintes:

- Laminar: 4,61%;
- $k-\varepsilon$ : 11,70%;
- $k-\varepsilon$ RNG: 12,34%;
- $k-\omega$ : 1,65%.

O desvio foi calculado com base na relação entre a temperatura média dos 11 pontos de coleta ao longo do DTF, entre os dados experimentais e os obtidos com os modelos numéricos.

Por apresentar resultados mais próximos aos dados experimentais, optou-se pelo uso do modelo de turbulência  $k-\omega$ , o qual possui melhores resultados em regimes transitórios, turbulentos e próximos a parede.

### 3.8.2 Efeito da fuligem

As partículas de fuligem são formadas principalmente devido à combustão incompleta, quando as condições de combustão são suficientemente ricas em combustível para permitir que as reações de polimerização e condensação deixem as partículas de fuligem formarem a nucleação e crescer. Estas são partículas altamente emissivas, que aumentam a radiação e a transferência de calor.

A constituição da fuligem é dependente da temperatura de devolatilização e da composição do combustível. Em geral, o estudo da formação e oxidação de fuligem requer o uso de mecanismos de reação combinados com modelos de turbulência para capturar corretamente os processos envolvidos. A Seção 2.5 detalhou os processos de nucleação, formação e combustão da fuligem e que foram empregados no modelo numérico desenvolvido neste trabalho.

Após análise de qual modelo de turbulência obteve resultados mais próximos aos experimentos, analisou-se o efeito da fuligem (*Soot*) no perfil de temperatura no interior do reator. A Figura 3.11 apresenta os resultados obtidos nos três formatos, sendo: experimental, modelo numérico  $k-\omega$  e modelo  $k-\omega$  sem fuligem.

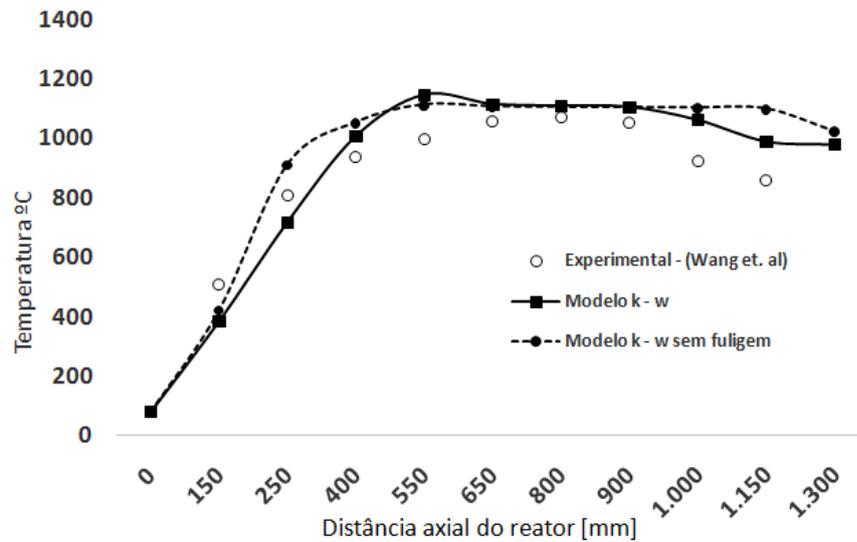


Figura 3.11 - Efeito da fuligem na temperatura.

O modelo  $k-\omega$  sem fuligem teve erro médio de 2,11% sendo este 0,46% superior ao modelo  $k-\omega$  com fuligem, justificando a escolha do modelo a ser adotado para a sequência do estudo numérico no reator. Destaca-se as diferenças de temperatura obtida na parte inicial do reator, onde ocorre a secagem e devolatilização do combustível e, na fase final, onde predomina a transferência de calor por radiação para o meio externo e a combustão da fuligem.

### 3.8.3 Modelos numéricos adotados

A Tabela 3.6 apresenta uma comparação entre as particularidades entre os modelos de Wang et al., 2014 e aquele implementado neste trabalho.

Tabela 3.6 - Diferença dos modelos encontrados na literatura e os adotados neste trabalho.

Item	Modelos	Wang (2014)	Presente trabalho
1	Escoamento dos gases	RANS	RANS
2	Modelo de combustão	EDM/FRC	EDM/FRC
3	Trajatória das partículas	Lagrangeana	Lagrangeana
4	Modelo de turbulência	$k - \varepsilon$	$k - \omega$
5	Secagem do combustível	NA <sup>1</sup>	Bryden/Xianchun
6	Devolatilização do carvão	NI <sup>2</sup>	Ubhayakar
7	Modelo de fuligem ( <i>Soot</i> )	NA <sup>1</sup>	Magnussen
8	Radiação/Modelo espectral	DOM/GC	DTRM/WSGG- <i>Soot</i>

<sup>1</sup> NA - Não aplicado

<sup>2</sup> NI - Não informado

O presente trabalho chegou a uma melhor concordância com os dados experimentais do que o de Wang et al., 2014 devido à implementação de modelos de secagem dos combustíveis, devolatilização de carvão, formação e combustão da fuligem e radiação com soma ponderada de gases, listados na Tabela 3.6. Adicionalmente, permitiu realizar análises adicionais como identificação das zonas de devolatilização e reação dos combustíveis, efeito da fuligem e taxa de aquecimento das partículas de combustível.

## 4 RESULTADOS

Nesta seção apresenta-se os resultados obtidos por meio do modelo numérico adotado nas simulações, o que possibilitou a análise de dados de devolatilização, taxa de queima, tamanho e temperatura da partícula de combustível, além das reações que ocorrem no interior do DTF, o que não é possível obter na análise experimental.

A Tabela 4.1 são apresentados os dados de entrada no reator, sendo mantidas as mesmas condições experimentais utilizadas por Wang et al., 2014.

Tabela 4.1 - Dados de entrada no reator.

Dado de Entrada	Carvão
Carvão [g/h]	25
Vazão de ar seco [L/min]	22
Temperatura de entrada do ar [°C]	80
Poder calorífico superior PCS – Carvão [MJ/kg]	35
Poder calorífico inferior PCI – Carvão [MJ/kg] <sup>1</sup>	33,6

<sup>1</sup> Considerando carvão betuminoso, com 1,7% de umidade.

Fonte: Autor.

O primeiro estudo considerou a combustão de carvão betuminoso, conforme composição elementar e imediata apresentadas na Tabela 3.3, sendo que a partícula do carvão é considerada com formato esférico, e com características de radiação de um corpo negro.

### 4.1 Combustão de carvão mineral

Nesta seção apresentam-se os resultados obtidos com o modelo numérico implementado para o caso de queima de carvão betuminoso como combustível, comparando os dados obtidos com os dados experimentais e numéricos de Wang et al., 2014.

#### 4.1.1 Tamanho e temperatura da partícula

Para a utilização em processos de transformação energética, o carvão mineral sofre uma preparação preliminar, a qual inclui a trituração em moinhos, que são responsáveis por reduzir o tamanho da partícula para diâmetros entre 30 e 1100 $\mu$ m. Esta redução de tamanho visa facilitar a alimentação de combustível e as reações de combustão no interior das

câmaras de combustão. Para os experimentos no DTF, o processo de preparação das amostras também se faz necessário, sendo etapa preliminar aos ensaios no reator.

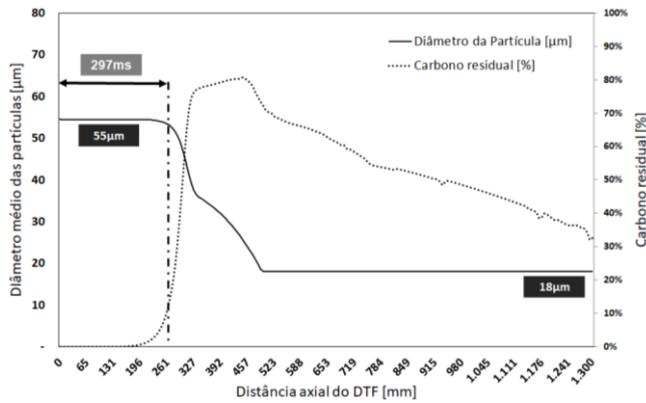
Para o caso da simulação numérica, no *software* é possível indicar quais são as características das partículas e sua distribuição geométrica, aproximando-se dos casos reais utilizados experimentalmente. Neste caso de estudo, foi aplicada uma distribuição estatística para injeção do combustível no domínio, onde os parâmetros de injeção para o carvão são estimados pela distribuição probabilística de acordo com o critério de Rosin-Rammler, já citados anteriormente, assumindo que as partículas se distribuem segundo a lei exponencial. A Tabela 4.2 apresenta as principais características atribuídas a partícula do carvão, utilizadas no presente trabalho.

Tabela 4.2 - Características da partícula de carvão.

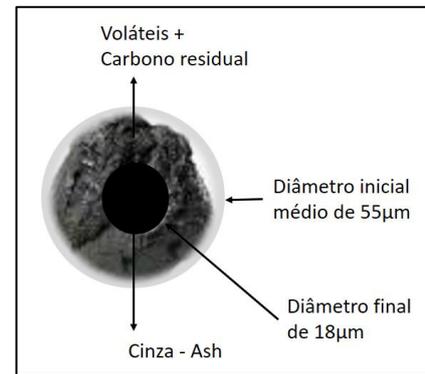
Descrição	Dado
Diâmetro mínimo da partícula de carvão [ $\mu\text{m}$ ]	30
Diâmetro máximo da partícula de carvão [ $\mu\text{m}$ ]	300
Formato da partícula	Esférica
Característica de radiação	Corpo negro

A distribuição das partículas varia de 30 a 300 $\mu\text{m}$ , sendo que aproximadamente 61% das partículas possuem diâmetro inferior a 70 $\mu\text{m}$ , com um fator de dispersão de 5,78. Considerou-se ainda que as partículas sejam esféricas, uniformemente distribuídas no orifício de entrada do reator e injetadas a uma velocidade de 0,74m/s.

A Figura 4.1 apresenta a evolução da partícula no carvão no interior do reator (a) e a Figura 4.1 (b) apresenta a variação de volume após as reações de devolatilização, de acordo com os resultados numéricos.



(a) Redução de diâmetro da partícula de combustível e geração de carbono residual



(b) Diâmetro inicial e final da partícula de combustível

Figura 4.1 - Evolução da partícula de combustível no interior do reator e formação de carbono residual.

Na Figura 4.1 (a) verifica-se a rápida decomposição da partícula de combustível (representada pela linha contínua), a qual sofre aquecimento, secagem e devolatilização durante os primeiros 260 mm da entrada do reator, percorrendo-os em um tempo total de 297 ms. Estes processos são observados em termos das características físicas da partícula, as quais possuem um volume constante durante a devolatilização e secagem, porém com sua densidade variável. Após esta posição do reator, a reação que predomina é a oxidação do carbono residual, a qual é representada pela linha tracejada sendo modelada com redução de tamanho da partícula com densidade constante. Nesta figura, fica clara a rápida devolatilização em comparação com a reação de oxidação mais lenta do carbono residual, a qual necessita de maior tempo de residência para combustão completa. A Figura 4.1 (b) mostra a variação de diâmetro que a partícula sofre, a qual inicia com diâmetro médio de 55  $\mu\text{m}$  e sai do reator com 18  $\mu\text{m}$ , com composição predominante de substâncias inertes (cinzas).

A velocidade e o tempo de residência das partículas de combustível no interior do reator podem ser observadas na Figura 4.2.

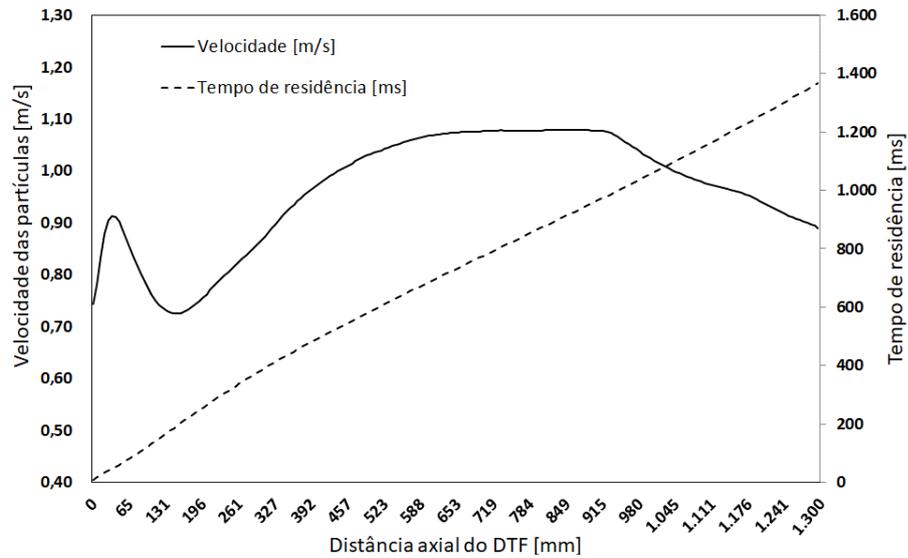


Figura 4.2 - Velocidade e tempo de residência das partículas de combustível no reator.

O carvão é injetado no reator a uma velocidade de 0,74m/s, sofrendo rápida aceleração nos primeiros 50mm da entrada. Logo após, inicia um processo de desaceleração, causado pelo aumento da área de seção transversal do escoamento, a qual inverte o comportamento a partir de 170mm da entrada, sendo gerado pela expansão volumétrica dos gases, devolatilização e início da combustão. A velocidade máxima que as partículas atingem é de 1,08m/s e ocorre entre as posições 600 e 930mm da entrada. A partir desta posição, o escoamento começa a sofrer interferência do bocal de saída, o qual afeta a temperatura e velocidade dos gases de combustão. O tempo total para a partícula percorrer o reator é de 1,37s.

Na Figura 4.3 são apresentadas a temperatura da superfície da partícula de combustível e a temperatura dos gases durante o percurso no reator.

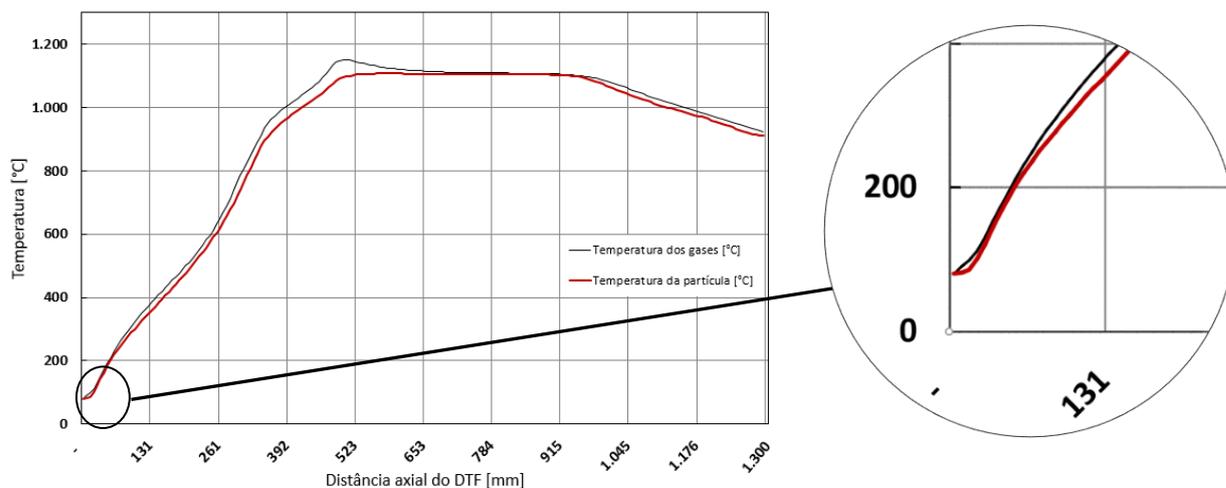


Figura 4.3 - Temperatura na superfície da partícula de carvão e temperatura dos gases durante percurso no reator.

Observa-se logo na entrada do reator o aquecimento da partícula e a posterior estabilização durante 21 ms. Este comportamento é explicado pela evaporação da umidade presente no combustível. Este comportamento é observado em todos os combustíveis sólidos, sendo intensificado com a umidade e com o diâmetro das partículas. Após o processo de secagem, a partícula é aquecida a uma taxa de  $1,64\text{ }^{\circ}\text{C/ms}$ , atingindo o pico de temperatura de  $1.106,8^{\circ}\text{C}$  a 575mm da entrada do reator.

#### 4.1.2 Liberação dos voláteis

O carvão betuminoso é caracterizado pelo seu baixo percentual de voláteis quando comparado com biomassas em geral, enquanto no carvão os voláteis compõem entre 15 a 40% da massa; na biomassa estes voláteis podem constituir até 80% em uma análise elementar. Para que o processo de devolatilização se inicie é necessário que se tenha a transferência de calor para a partícula, até que está atinja a temperatura superior a  $350^{\circ}\text{C}$ , dando início ao processo de liberação dos voláteis.

Segundo Karlstron, 2017, o balanço de energia durante a fase de devolatilização do carvão é nulo, ou seja, a energia necessária para o aquecimento da partícula e reações de devolatilização é igual a energia liberada nesta fase, diferentemente do que ocorre na fase de secagem, a qual é predominantemente endotérmica.

Pelos recursos disponíveis na modelagem numérica, é possível fazer análises adicionais as que são usualmente obtidas em experimentos, como as apresentadas na Figura

4.4, a qual apresenta a temperatura da face da partícula no momento que inicia o processo de devolatilização do carvão.

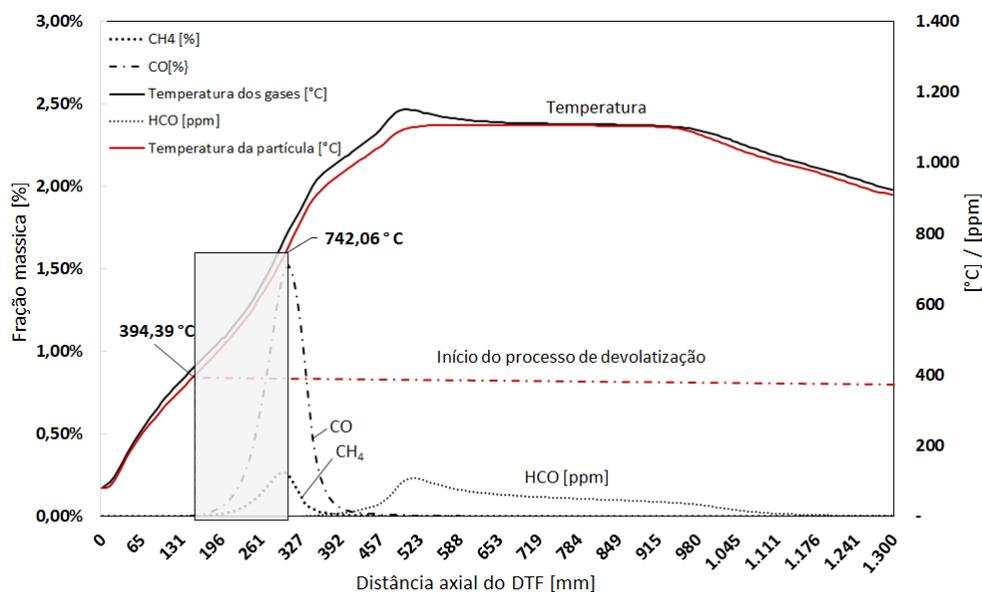


Figura 4.4 - Início do processo de devolatilização versus temperatura na face da partícula.

Analisando o gráfico da devolatilização, pode-se identificar que o início da formação de CO e CH<sub>4</sub> ocorre concomitante a uma temperatura da partícula de aproximadamente 394,39°C, e atinge o auge da concentração mássica no reator a 307mm da entrada, quando a partícula está a uma temperatura de 742,06°C, onde o processo de oxidação se intensifica, formando a chama e liberando energia, sendo observado pela taxa de consumo de O<sub>2</sub>. O tempo total que a partícula levou para a devolatilização foi de 197ms, o qual é identificado pelo início de formação dos gases voláteis, como CO e CH<sub>4</sub>, e com término determinado pela máxima fração de carbono residual. Após esta etapa, a reação que predomina no reator é a de oxidação do carbono residual.

#### 4.1.3 Oxidação do carbono residual e fuligem

O carbono residual do carvão betuminoso possui características porosas e o tempo de oxidação está diretamente ligado a taxa de aquecimento que a partícula está exposta, proporção de oxigênio, temperatura e ao seu diâmetro. Geralmente, este processo é mais lento se comparado à devolatilização. Devido a característica porosa e ao oxigênio presente na sua composição, a oxidação ocorre na superfície e também no interior da partícula segundo Karlstron, 2017.

A Figura 4.5 apresenta a oxidação do carbono residual (linha pontilhada) com a formação e combustão da fuligem (*Soot*), em comparação com os perfis das temperaturas dos gases e da partícula.

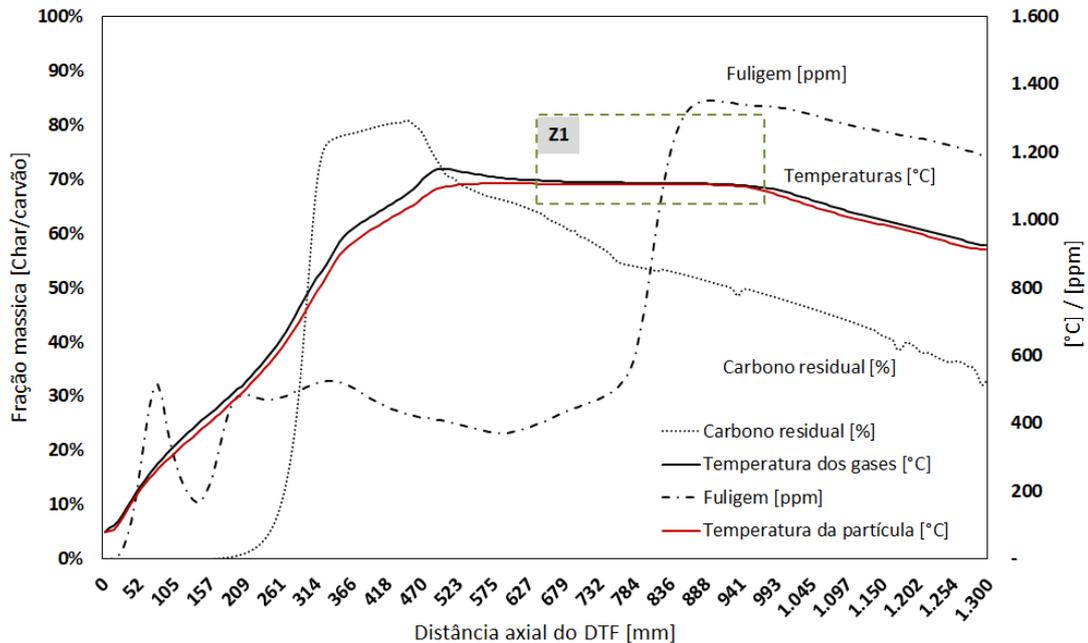


Figura 4.5 - Oxidação do carbono residual e formação de fuligem (*Soot*).

O surgimento do carbono residual ocorre após as etapas iniciais de secagem e devolatilização, conforme representado no gráfico pela linha pontilhada, a qual representa a massa de carbono residual em relação a evolução da massa da partícula de combustível. Analisando o dado de carbono residual, observa-se uma diferença entre a modelagem numérica e os experimentos.

Salvo a exceção destacada no parágrafo anterior, o restante do processo de oxidação do carbono residual no modelo numérico corresponde às condições reais de combustão de carvão, e podem ser avaliadas como tal.

O tempo para início da reação de oxidação do carbono residual foi de 542ms, a 410mm do ponto de injeção das partículas e na temperatura próxima a 1000°C, percorrendo 826ms nesta etapa, até a extensão máxima do reator, sendo este um tempo 4,2 vezes superior ao necessário para a devolatilização.

Outra característica que representa a oxidação do carbono residual relaciona-se ao fato de que a temperatura da partícula, a qual pode ser maior ou igual a temperatura dos gases, o que é observado na região em destaque (Z1) na Figura 4.5. Este efeito é causado pelas

reações de oxidação na face e ou interior da partícula, a qual se torna porosa durante a reação de oxidação.

Apesar do excesso de ar utilizado na simulação (585%), o efeito da fuligem nos resultados ficou evidente, conforme apresentado na Seção 3.8.2, tendo maior impacto na zona de devolatilização e na parte final do reator que, devido as suas características altamente emissivas, aumentam a transferência de calor por radiação nesta posição do reator. Desta forma, uma análise e a consideração do efeito da fuligem para a radiação térmica são necessárias na condução de simulações numéricas desenvolvidas nos reatores do tipo DTF.

A formação da fuligem teve início concomitante com a etapa de secagem e devolatilização, sendo intensificada após a elevação da temperatura acima dos 1.100°C no interior do reator, para um tempo de residência superior a 950ms, quando atingiu o nível de 1.350ppm (partes por milhão). Após a nucleação e a formação da fuligem, observou-se um leve declínio da sua concentração ao final do reator. Entende-se que está ocorrência seja gerada pelas reações de combustão a que estas partículas estão sujeitas, justificando a redução constatada.

#### **4.1.4 Temperatura dos gases no interior do reator e burnout**

Os resultados mais comumente obtidos em experimentos com DTF são as medições de temperatura, tempo de residência e as taxas de *burnout* em cada posição do reator, para diferentes condições de operação. Estes dados são essenciais para a determinação dos fatores pré-exponenciais das reações de oxidação dos combustíveis, permitindo o desenvolvimento de modelos numéricos para predição destas taxas.

A Figura 3.8 apresenta os perfis de temperatura medidos ao longo do eixo axissimétrico do DTF para os dois casos avaliados. Considera-se também os resultados numéricos desenvolvido por Wang et al., 2014 em comparação aos do presente trabalho.

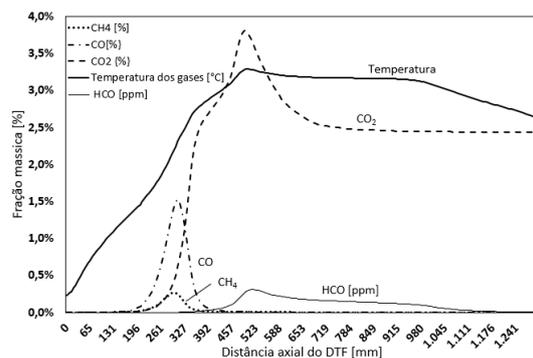
Os dados coletados de temperatura são caracterizados por um aumento inicial da temperatura bastante similar nos dois modelos, resultante principalmente do aquecimento induzido do reator e também pelo início da combustão dos voláteis. Nota-se que o modelo desenvolvido no presente trabalho caracterizou inclusive a zona de combustão, constatada pela elevação de temperatura nesta região, fato não observado no modelo de Wang et al., 2014.

O *burnout* permite avaliar a reatividade do combustível. A Figura 3.9 apresentou o comportamento de *burnout* em relação à posição do reator para os dados de Wang et al., 2014 e os obtidos no presente trabalho.

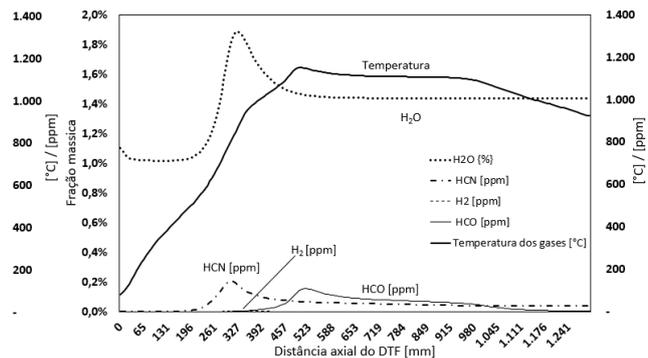
Verificou-se uma tendência de aproximação dos valores obtidos pelo presente trabalho com aqueles obtidos por Wang et al., 2014. Nota-se que o *burnout* atinge níveis bem elevados na primeira metade do reator, chegando a 90% de taxa de queima do combustível. Isto acontece porque a temperatura dos gases é elevada e o tempo de residência é suficientemente longo para que todos os voláteis sejam liberados e o carbono fixo, o qual necessita de maior tempo de residência, oxide na segunda metade do reator.

As reações de secagem e o início da devolatilização ocorrem na entrada do reator, sendo a posteriori a queima dos voláteis, e, devido a este fato, a taxa de queima é zero até os 150mm da entrada do reator. Tanto o modelo numérico como as medições do experimento de Wang et al., 2014 apresentam taxas de *burnout* desde a entrada do reator, sendo pouco prováveis que ocorram devido ao tempo de aquecimento das partículas para a secagem e início da devolatilização, conforme indicado na Seção 4.1.2.

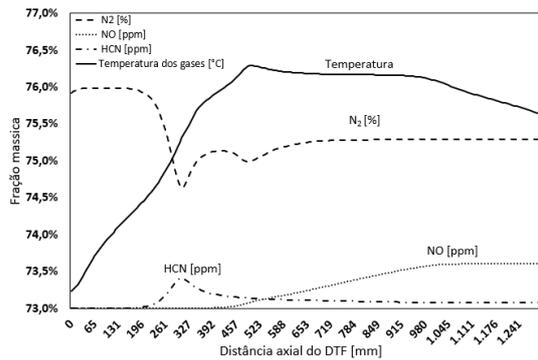
A formação de algumas espécies químicas, como HCN, H<sub>2</sub>, HCO, CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> e NO<sub>x</sub>, resultantes da devolatilização e queima do carvão e voláteis, podem ser observadas na Figura 4.6, gráficos (a), (b), (c) e (d).



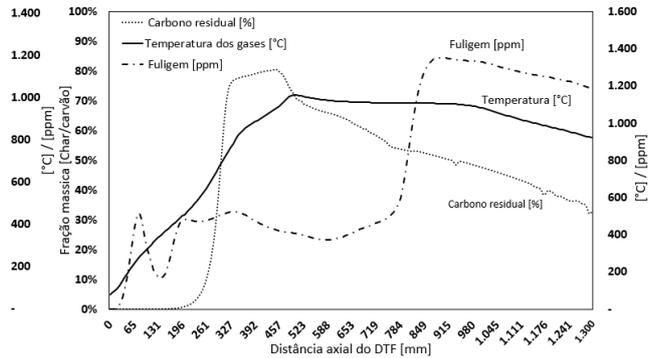
(a) Fração mássica de CO, CH<sub>4</sub>, HCO e CO<sub>2</sub>



(b) Fração mássica de HCN, HCO, H<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O



(c) Fração mássica de HCN e NO



(d) Fração mássica de Soot e Char

Figura 4.6 - Formação de espécies químicas durante as etapas de devolatilização, oxidação do carbono residual, formação de Fuligem (*Soot*) e NOx.

Nos gráficos apresentados na Figura 4.6, pode-se analisar o surgimento de algumas moléculas como CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, HCO, HCN, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NO e fuligem durante as etapas de devolatilização e combustão.

#### 4.1.5 Perfil de O<sub>2</sub> no reator

A Figura 4.7 apresenta a fração mássica de oxigênio ao longo do reator. Foram avaliadas a concentração média de oxigênio e na linha de centro do reator, considerando que o ar na entrada do DTF esteja na pressão atmosférica, 101,325 kPa, com sua concentração mássica de oxigênio igual a 23%, com 1% de vapor d'água e 76% de nitrogênio, a uma temperatura de 80°C.

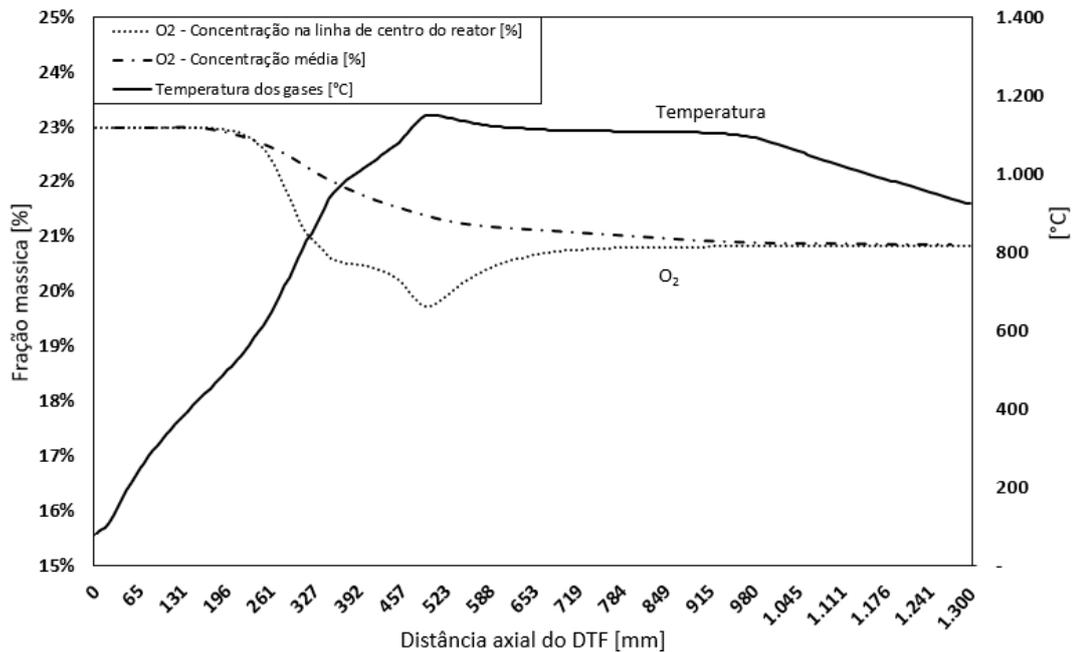


Figura 4.7 - Fração mássica média de O<sub>2</sub> nos gases e na linha de centro do reator.

A concentração mássica média de O<sub>2</sub> nos gases de exaustão, sofre queda acentuada na zona de maior intensidade de queima no reator (entre a faixa de 250 à 470mm) e após esta faixa, uma queda leve, porém, constante até a posição de 1.100mm, estabilizando na concentração de 20,88% até a saída do reator.

Quanto ao decaimento e ao comportamento da fração mássica de O<sub>2</sub> sobre a linha de centro do reator (DTF), analisando a Figura 4.7 conjuntamente com Figura 4.6 (C), nota-se que o comportamento do perfil do N<sub>2</sub> é muito próximo ao do O<sub>2</sub> (forma da curva, respeitadas as magnitudes). Contudo, como o N<sub>2</sub> é inerte, este comportamento não pode estar associado a nenhuma reação e, assim, tem-se que o as variações da fração mássica de N<sub>2</sub> estão associadas a outros efeitos devido ao escoamento, como mistura e diluição com outros gases gerados na combustão dos voláteis e queima do carbono residual. Baseando-se nisto, conforme mostrado nas Figura 4.9 para o O<sub>2</sub>, constata-se que o resultado da perturbação no escoamento devido à combustão da partícula mais acima no domínio, além de uma diluição no fluxo das espécies, também uma homogeneização das frações mássicas e da energia ao longo da linha de centro do domínio em relação à nova composição dos gases de combustão. Assim, a queda inicial na fração de O<sub>2</sub> está associada ao processo de combustão de voláteis e carbono residual e pela inclusão de outras espécies oriundas da queima, sendo que o aumento percebido a cerca de

653 mm da entrada ocorre devido à uma diluição e uma homogeneização do escoamento, pois na periferia do jato de entrada de combustível tem-se alta concentração de  $O_2$ . Assim, como resultado tem-se que a fração de oxigênio na saída do reator é elevada devido ao excesso de ar utilizado no modelo.

#### 4.2 Análise das espécies químicas na composição dos gases de combustão ao longo do DTF

Nesta seção são apresentados os parâmetros relativos a concentração de espécies. A Tabela 4.3 apresenta a temperatura e as concentrações médias de diferentes espécies presentes nos gases de combustão na seção de saída do DTF, obtidas através das simulações.

Tabela 4.3 - Propriedades médias dos gases de combustão na seção de saída do DTF.

Propriedades	Carvão
$Y_{N_2}$ [kg/kg]	0,7529261
$Y_{O_2}$ [kg/kg]	0,2084713
$Y_{CO_2}$ [kg/kg]	0,0242053
$Y_{H_2O}$ [kg/kg]	0,0143981
$Y_{Soot}$ [ppm]	1.350
$Y_{HCN}$ [ppm]	26,06
$Y_{NO}$ [ppm]	21,16
$Y_{CO}$ [ppm]	0,11
Temperatura média [°C]	848,81

A Figura 4.8 apresenta as vistas no plano transversal sobre o eixo axissimétrico do DTF, representando os campos de temperatura,  $CH_4$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  e fuligem no presente trabalho.

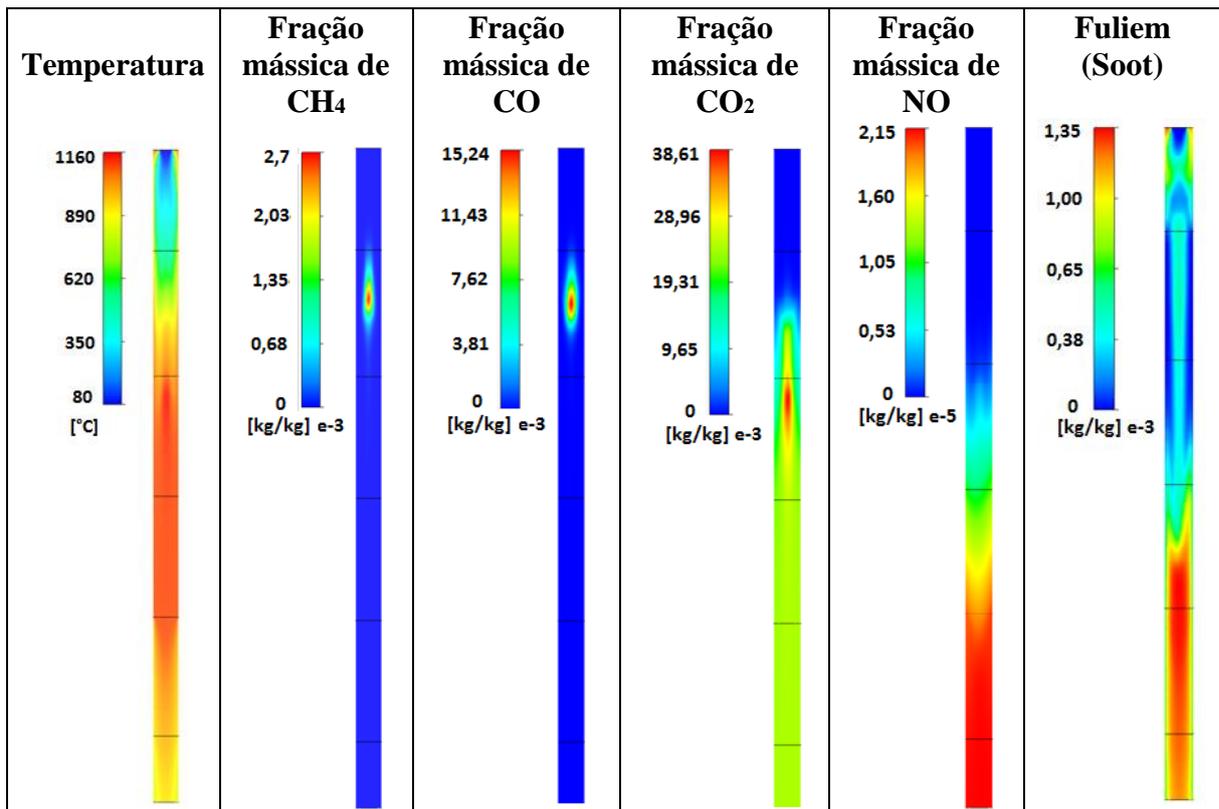


Figura 4.8 - Vistas do plano transversal no centro do DTF, representando Campos de Temperatura, CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, NO e Fuligem (*Soot*).

É possível comparar as diferenças entre as simulações, como: zona de aquecimento, devolatilização, combustão, com o consumo de oxigênio e formação de CO<sub>2</sub> e, por fim, as zonas de formação de NO e fuligem (*Soot*).

Em toda a extensão do DTF percebe-se a formação de fuligem, especialmente na metade inferior do reator, reforçando a importância da implementação do modelo de fuligem, assim como a avaliação espectral desta para a inclusão no modelo WSGG na transferência de calor por radiação. É também na segunda metade do reator que ocorre a formação de NO, em função do mecanismo *Thermal e Fuel-NO*.

Os resultados obtidos para NO variaram entre 12,25 a 21,17 ppm, sendo estes valores baixos se comparados com dados de câmaras de combustão tradicionais. Os menores níveis de NO foram ocasionados principalmente pelo elevado nível de excesso de ar (585%), baixo tempo de permanência no reator (1,37 segundos), e pelo fato da temperatura, a qual é o fator predominante na reação de formação do NO, não ser muito elevada. Altas temperaturas abrem sítios de nitrogênio na matriz do carvão durante a combustão, o que leva a uma maior

conversão do nitrogênio combustível em NO, pelo mecanismo de *Fuel NO<sub>x</sub>*. Neste estudo todas as simulações ocorreram em temperaturas entre 900 e 1.150°C, sendo que as variações são consequência da energia liberada nas reações durante a combustão.

A Figura 4.9 apresenta as vistas no plano transversal axial no centro do DTF, representando os campos de H<sub>2</sub>, HCN, HCO, H<sub>2</sub>O e O<sub>2</sub>.

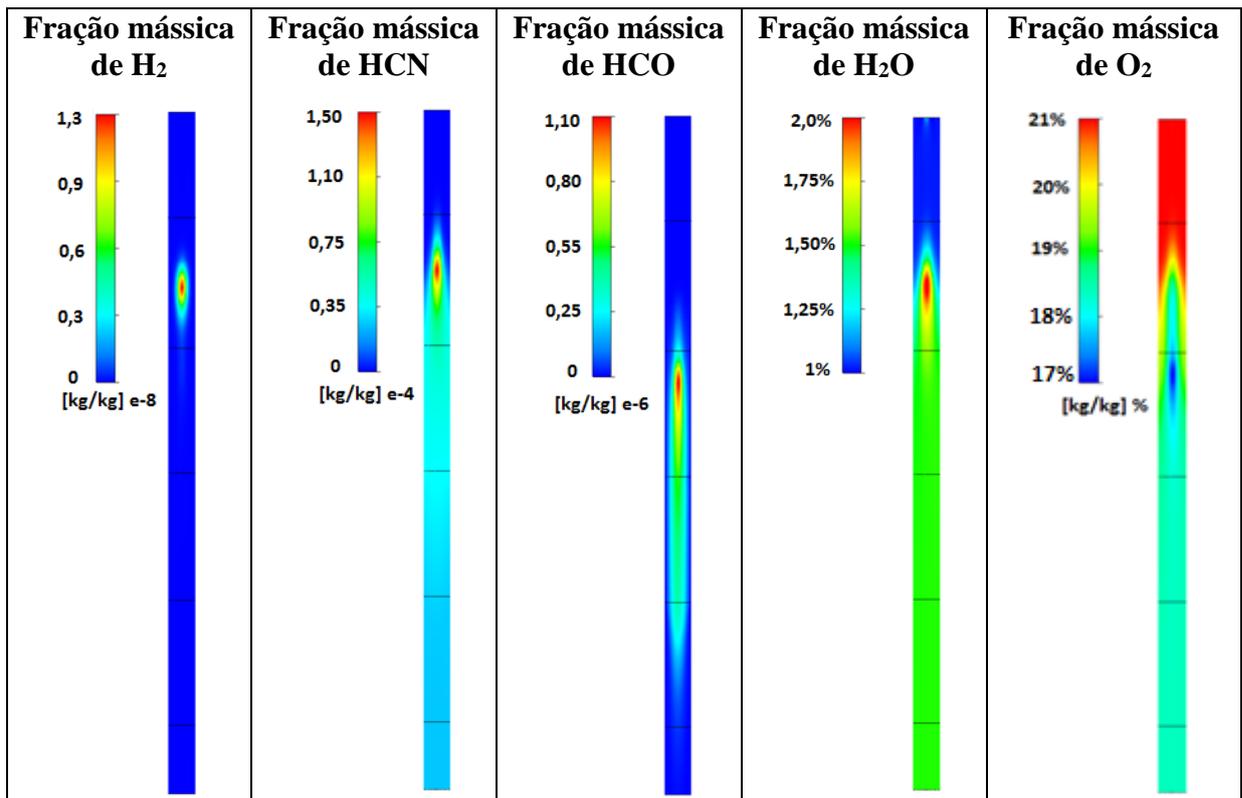


Figura 4.9 - Vistas do plano transversal no centro do DTF, representando Campos de H<sub>2</sub>, HCN, HCO, H<sub>2</sub>O e O<sub>2</sub>

É possível observar os resultados que indicam o comportamento das reações que ocorrem com o hidrogênio e oxigênio ao longo do reator. Efeito similar as reações que envolvem o carbono, ocorre com o hidrogênio.

A Figura 4.10 apresenta as vistas no plano transversal axial no centro do DTF, representando as principais reações que ocorrem durante a queda das partículas de combustível no reator.

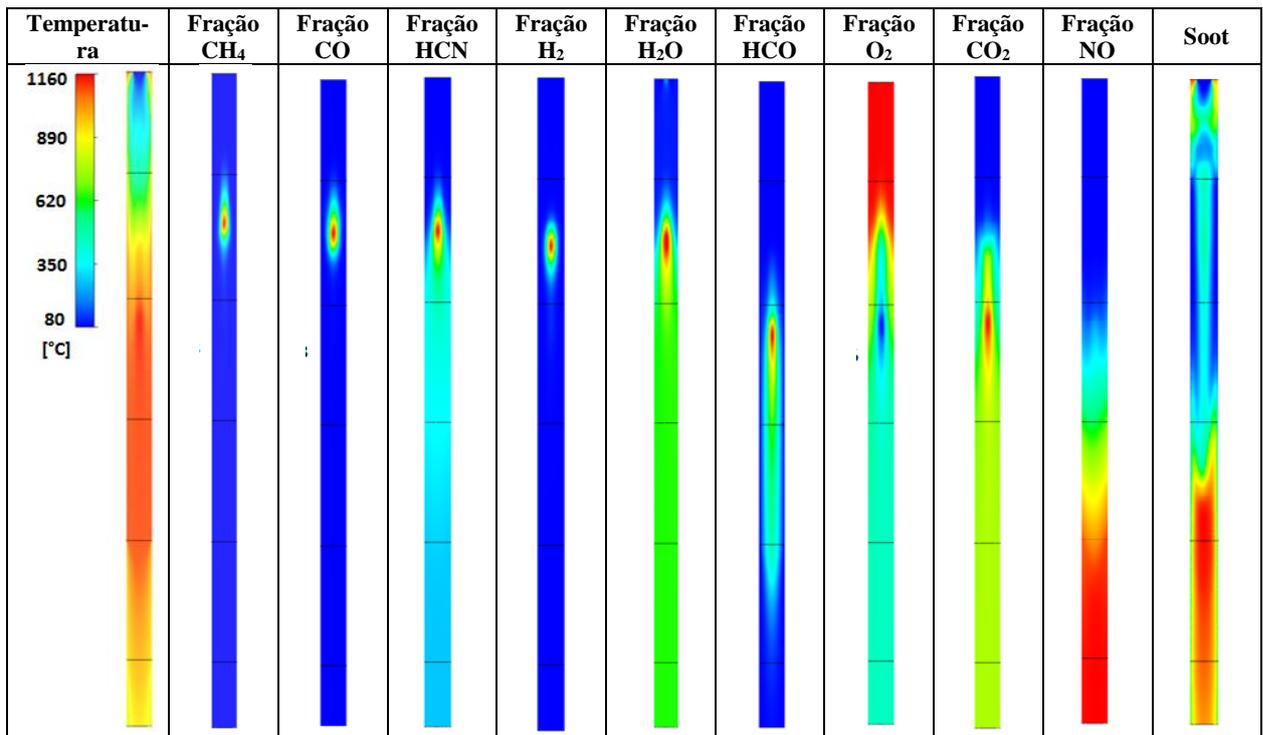


Figura 4.10 - Vistas do plano transversal no centro do DTF, representando os principais produtos que se formam no reator.

É possível correlacionar a temperatura e em que distância da entrada do domínio ocorrem as reações. A segunda zona do reator é entre 450 e 900 mm após a entrada do DTF. Nesta região predominam as reações de oxidação das moléculas de combustível, gerando reações exotérmicas e, por consequência, elevando a temperatura do interior do reator. É nesta faixa que ocorre a formação de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O e consumo de O<sub>2</sub>. Também é possível identificar a formação de HCO, o qual ocorre em elevadas temperaturas (acima de 1000°C), tendo a formação logo após a faixa onde se concentra a chama.

A terceira e última faixa do reator, predomina a reação de oxidação do HCO, além da formação e combustão da fuligem, assim como a formação de NO, sendo que ambas reações necessitam de temperatura elevada (maior que 1000°C). Estas reações ocorrem após os 900mm da entrada do reator e decorrem até o final do domínio. Nesta faixa observa-se a redução da temperatura dos gases de combustão, gerado pela radiação com o meio externo do reator, perda térmica com as paredes e, influência da fuligem na transferência de calor.

## 5 METAMODELO PARA O DTF

As penalidades em tempo de processamento e necessidade de recursos computacionais de alto desempenho ligadas à simulação em CFD motivou o desenvolvimento de um metamodelo que permite a aplicação e obtenção dos principais resultados para temperatura dos gases, carbono residual, NOx, *burnout*, fração de cinza residual e fuligem de forma rápida e que podem ser aplicados em *softwares* de livre acesso. A geração de um banco de dados de simulação com CFD permaneceu necessária, mas sua aplicação ganhou mais dinamismo.

O planejamento da definição dos parâmetros de saída do metamodelo e a montagem do banco de dados de simulações foi elaborado com o auxílio da metodologia estatística *Design of Experiments* (DoE).

A abordagem de um fator por vez, ou *One Factor at a Time* (OFAT) fornece uma análise de sensibilidade baseada sobre a influência que cada fator sozinho tem em um determinado fator de resposta. A interdependência entre os fatores de entrada varia em níveis diferentes e compreender como sua combinação pode afetar a saída requer uma abordagem diferente. A metodologia DoE pode executar explorações planejadas com dados simulados ou dados experimentais e é uma ferramenta adequada para identificar a sensibilidade acoplada de fatores de múltiplas entradas na saída do modelo de acordo com Montgomery, 1997. Entre as técnicas conhecidas, empregou-se o método fatorial completo (fatorial  $3^k$ ) com composição central é capaz de gerar um número adequado de combinações para analisar o efeito das variáveis no modelo. Os três fatores de entrada selecionados são, nomeadamente, o excesso de ar, a umidade e o teor de cinzas no combustível, conforme Tabela 5.1. Estes critérios foram selecionados por se entender que suas variações afetam o processo de queima, e também pelo fato de não estarem associados aos parâmetros de reatividade do combustível.

Tabela 5.1 - Dados de entrada para a aplicação no DoE.

Variável de Entrada	Descrição	Mínimo	Máximo	Unidade
Excesso de ar	Vazão de ar na entrada do reator	4,5	22	L/min
Umidade	Percentual de umidade no combustível	1,5	12	%
Cinza	Percentual de cinza no combustível	1,5	10	%

Os seguintes critérios foram adotados para definir os níveis máximos e mínimos de cada variável, sendo:

1. excesso de ar: Nível inferior de 20% de excesso de ar e nível superior de acordo com os dados experimentais (585% de excesso);
2. umidade: Percentual de umidade usualmente obtido em carvão betuminoso, tendo patamar inferior próximo ao dado experimental (1,7%);
3. teor de cinzas: Percentual de cinza usualmente obtido em carvão betuminoso, tendo patamar inferior próximo ao dado experimental (2,3%).

Os demais dados de entrada do reator foram mantidos constantes, sendo eles: vazão de combustível, composição de enxofre e nitrogênio do carvão, além da temperatura interna e temperatura do ar na entrada do reator, bem como as constantes dos modelos de secagem, devolatilização e combustão do carbono residual e voláteis. Como a proporção de carvão bruto (*RawCoal*) é uma variável dependente da cinza e umidade, não fez parte das variáveis de entrada no modelo de DoE, sendo obtida com a subtração da fração mássica de cinza e umidade da massa total de combustível na entrada do reator.

### **5.1 Aplicação da metodologia DoE para determinar as simulações e cruzamento das variáveis**

Foi aplicada a técnica de experimento fatorial multinível (fatorial 3k) para as variáveis de entrada definidas do processo, ou fatores de controle, e suas respectivas faixas. A técnica combina valores máximos, mínimos e intermediários dos fatores de controle. A determinação das combinações de valores de entrada para as simulações foi elaborada com o auxílio do *software* Minitab, conforme a Figura 5.1.

Uma faixa mais ampla de excesso de ardo que aquela relatada nos dados experimentais (aproximadamente 585%) foi testada para melhorar a elucidação da influência desta variável. Com base nos critérios adotados na metodologia DoE, foram definidas as 27 simulações adicionais a serem aplicadas, conforme dados e combinações apresentadas na Tabela 5.2.

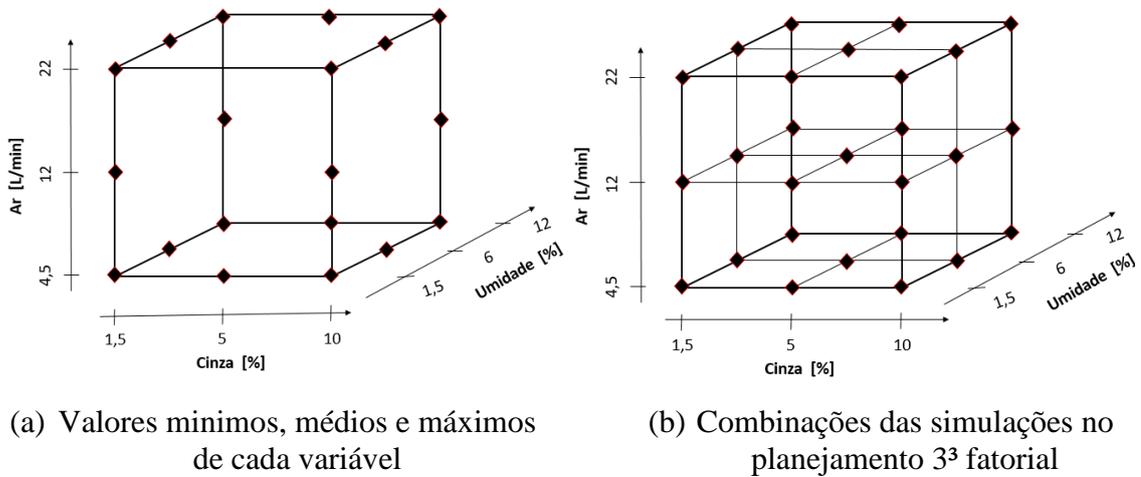


Figura 5.1 - Representação dos fatores de controle do planejamento experimental.

Tabela 5.2 - Simulações e variáveis a serem aplicadas de acordo com os resultados obtidos com a metodologia DoE.

Nº da Simulação	Combustível	Excesso de Ar		Composição elementar		
	Carvão [g/h]	Vazão [L/min]	Exc. [%]	Umidade [%]	Cinza [%]	Carvão Bruto [%]
1	25	12	319	12	5	83
2	25	4,5	120	1,5	1,5	97
3	25	12	319	1,5	1,5	97
4	25	22	585	12	5	83
5	25	12	319	1,5	10	88,5
6	25	12	319	6	5	89
7	25	4,5	120	1,5	5	93,5
8	25	4,5	120	6	5	89
9	25	22	585	1,5	5	93,5
10	25	22	585	6	10	84
11	25	4,5	120	12	5	83
12	25	4,5	120	12	1,5	86,5
13	25	4,5	120	6	10	84
14	25	4,5	120	12	10	78
15	25	22	585	6	1,5	92,5
16	25	22	585	1,5	10	88,5
17	25	4,5	120	1,5	10	88,5
18	25	22	585	6	5	89
19	25	12	319	1,5	5	93,5
20	25	4,5	120	6	1,5	92,5

21	25	12	319	12	10	78
22	25	22	585	12	1,5	86,5
23	25	12	319	6	10	84
24	25	12	319	12	1,5	86,5
25	25	22	585	12	10	78
26	25	22	585	1,5	1,5	97
27	25	12	319	6	1,5	92,5

Foram realizadas as 27 simulações adicionais em relação a condição inicial, conforme o cruzamento dos dados apresentados na Tabela 5.1, o que resultou em acréscimo de aproximadamente 810 horas de processamento.

Os dados de saída para os metamodelos foram: temperatura dos gases, *burnout*, carbono residual (*Char*), fração de cinza residual (*Ash Residual*),  $\text{NO}_x$  e fuligem (*Soot*). Estes dados de saída foram definidos pela possibilidade de comparar seus resultados com os dados experimentais para temperatura e *burnout*, e com os dados do modelo numérico do CFX<sup>®</sup> para as demais saídas adotadas.

## 5.2 Saída do DoE

O reator foi subdividido em sete (7) zonas, conforme a Figura 5.2 com geração de dados em cada ponto de análise, possibilitando comparação com o modelo numérico e com os dados experimentais de Wang et al., 2014.

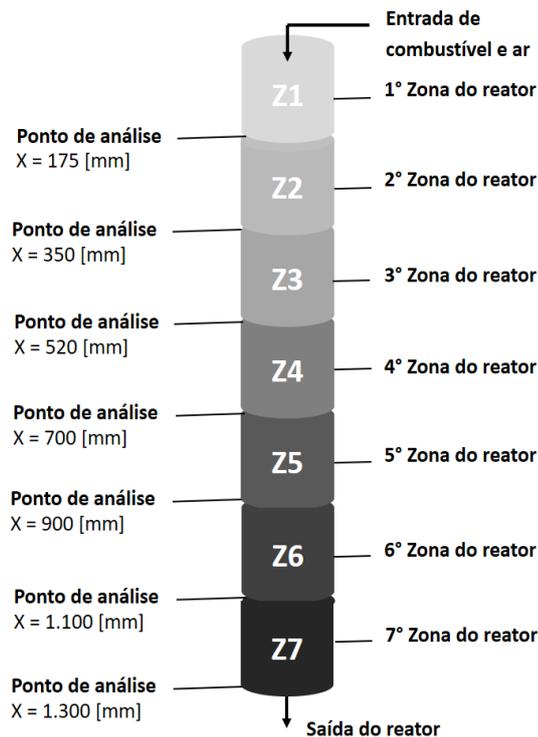
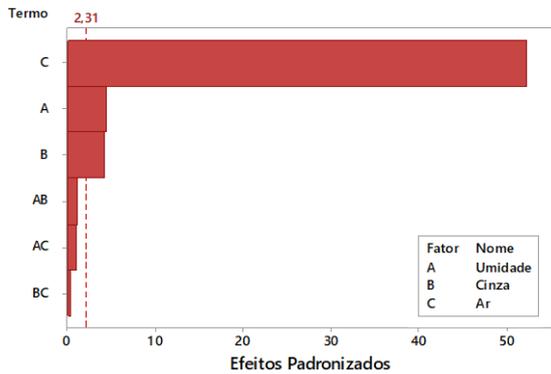


Figura 5.2 - DTF Zonas de análise e coleta de dados e geração das equações do metamodelo

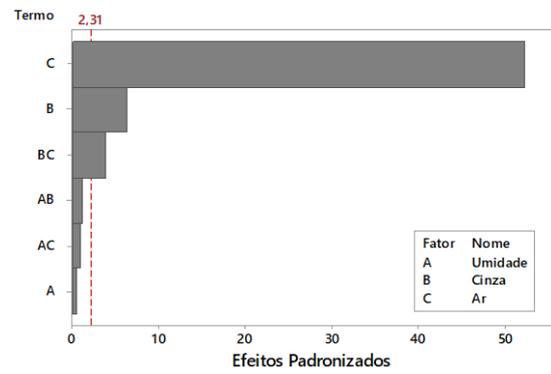
As distâncias entre as zonas Z1 a Z7 no eixo Y coincidem com as posições de coleta dos resultados experimentais de temperatura dos gases e *burnout*, possibilitando a geração de equações intermediárias e, por consequência, a criação dos perfis de comportamento no interior do reator ao longo da queda das partículas.

Foi possível avaliar a correlação entre as variáveis de entrada e gerar as equações do metamodelo que caracterizam o comportamento das reações predominantes no interior do reator e em cada zona definida

A Figura 5.3 apresenta o efeito das variáveis de entrada e suas respectivas correlações nos resultados de temperatura média e fuligem na saída do reator.



(a) Pareto – Efeito na temperatura

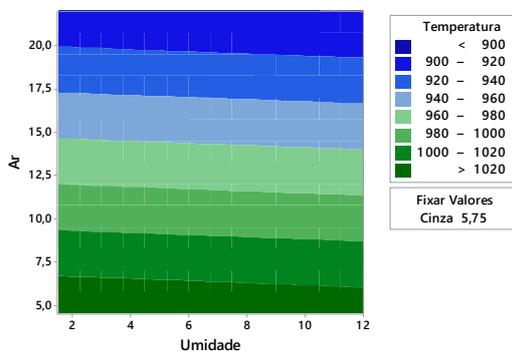


(b) Pareto – Efeito na fuligem

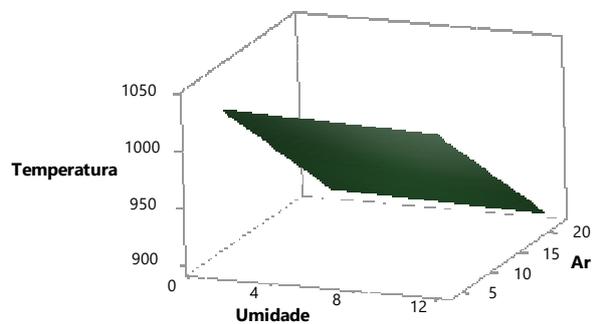
Figura 5.3 - Variáveis de maior relevância para os resultados de temperatura média e fuligem na saída do reator.

Este gráfico é chamado de Pareto e mostra os valores absolutos dos efeitos padronizados desde o maior até o menor efeito. Esses gráficos possibilitaram identificar quais as principais variáveis e as correlações entre elas, que causam impacto nos resultados de temperatura e fuligem dos experimentos com o reator. A linha tracejada na vertical delimita as variáveis que causam, estatisticamente, maior interferência nos resultados, sendo estas as que ultrapassam a linha de referência. Nesse caso, as barras que cruzam a linha são estatisticamente significativas ao nível de 0,05. Desta forma, as variáveis ou correlações entre elas que tiverem resultados inferiores podem ser descartadas, simplificando as equações que irão representar as variáveis de saída. O gráfico de Pareto foi baseado no intervalo de confiança de 95%.

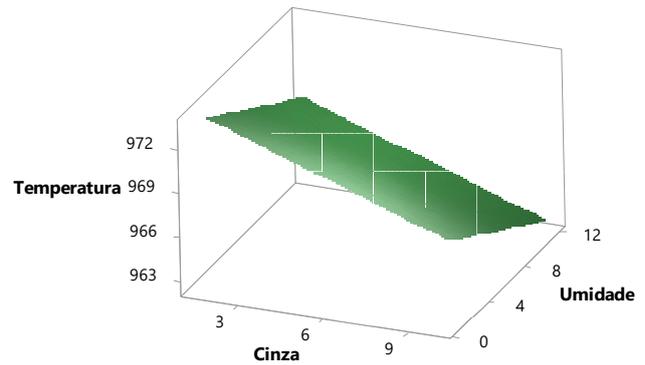
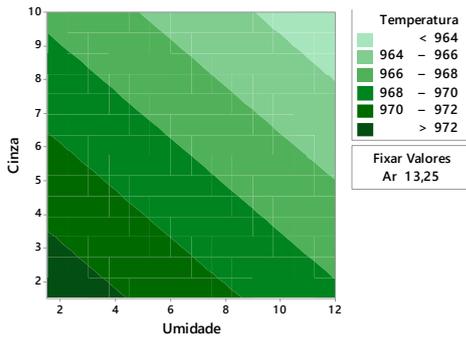
As imagens da Figura 5.4 apresentam a variação do resultado de temperatura do reator, com a alteração dos dados de entrada.



(a) Gráfico de contorno: Umidade e vazão d ar

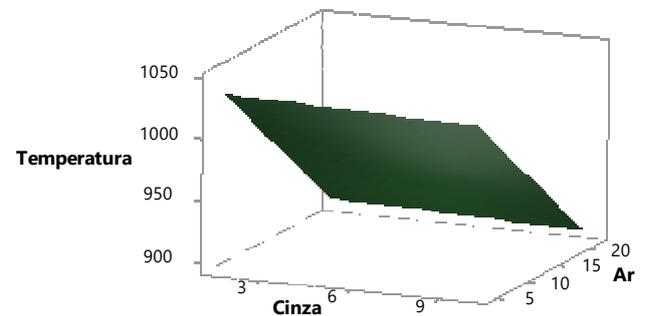
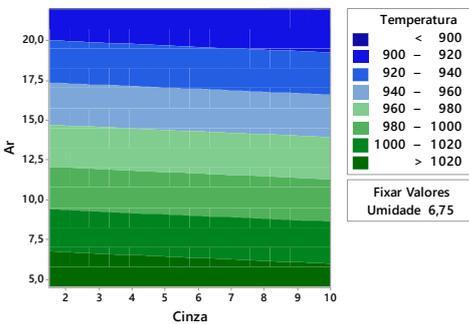


(b) Gráfico de superfície: Umidade e vazão de ar



(c) Gráfico de contorno: Umidade e cinza

(d) Gráfico de superfície: Umidade e cinza



(e) Gráfico de contorno: Cinza e vazão de ar

(f) Gráfico de superfície: Cinza e vazão de ar

Figura 5.4 - Método de Superfície de Resposta (RSM) para os resultados de temperatura, variando vazão de ar, umidade e cinza do combustível.

Os resultados sugerem uma relação linear entre excesso de ar e a temperatura, conforme representado na Figura 5.4 (a), assim como teor de cinzas (c) e umidade do combustível (e). A alta taxa de excesso de ar foi a variável que mais interferiu na temperatura do reator, gerando até 10% de redução na temperatura média. A combinação entre elevados teores de umidade, cinza e excesso de ar, causaram o maior impacto nos resultados, ocasionados pela redução de energia do combustível e agravados pela maior velocidade dos gases, quando em vazão elevada.

A Figura 5.3 (b) representa as variáveis que mais interferem no resultado de fuligem, sendo: excesso de ar, cinza e a correlação entre elas o que causou maior impacto nos resultados. O excesso de ar causa redução na temperatura do reator e menor tempo de residência das partículas, tendo como consequência elevação nos níveis de fuligem.

A geração de equações para as reações que ocorrem no reator com o auxílio do DoE foi feita para a temperatura dos gases, carbono residual, fração mássica de cinza na

partícula, fuligem e NOx. Estas equações são válidas para o volume de controle do reator do DTF, aquecido artificialmente a 1.110°C e alimentado com carvão betuminoso com características entre os limites apresentados na Tabela 5.1. A Tabela 5.3 apresenta as equações em cada zona para a temperatura, além da temperatura média do reator, fuligem e NOx totais na saída.

Tabela 5.3 - Equações do metamodelo para temperatura e NOx na saída do reator.

		Equações do metamodelo para o DTF - Temperatura	
		Temperatura [°C]	
	Entrada de combustível e ar		
	Z1	1ª Zona do reator	<b>Zona 1</b> $TZ1 = 1348,2 - 166,62 EA + TE$
Ponto de análise X = 175 [mm]	Z2	2ª Zona do reator	<b>Zona 2</b> $TZ2 = 0,25218 TZ1 - 140,3 UmC + 820,65$
Ponto de análise X = 350 [mm]	Z3	3ª Zona do reator	<b>Zona 3</b> $TZ3 = 0,368 TZ2 + 72,7 Cz + 26,26 EA - 98,8 EA + 656$
Ponto de análise X = 520 [mm]	Z4	4ª Zona do reator	<b>Zona 4</b> $TZ4 = 0,4341 TZ3 + 614,2$
Ponto de análise X = 700 [mm]	Z5	5ª Zona do reator	<b>Zona 5</b> $TZ5 = 0,5134 TZ4 + 2,802 EA + 518,6$
Ponto de análise X = 900 [mm]	Z6	6ª Zona do reator	<b>Zona 6</b> $TZ6 = 0,3854 TZ5 - 104,24 Cz + 21,985 EA + 4,57 Cz EA + 472$
Ponto de análise X = 1.100 [mm]	Z7	7ª Zona do reator	<b>Zona 7</b> $TZ7 = 0,95057 TZ6 - 49$
Ponto de análise X = 1.300 [mm]			<b>Temp. Média</b> $TM = 4,5 Cz EA - 28,64 EA - 83,8 Cz + TE + 992,85$
			<b>NOx na saída</b> $NOx = 0,0739 T - 48,4$

**Onde:**

<b>TM:</b> Temperatura Média no Reator [°C]	<b>TZ1:</b> Temperatura na Zona 1 [°C]
<b>TE:</b> Temperatura de Entrada do Ar [°C]	<b>TZ2:</b> Temperatura na Zona 2 [°C]
<b>UmC:</b> Umidade do Carvão [%]	<b>TZ3:</b> Temperatura na Zona 3 [°C]
<b>Cz:</b> Cinza do carvão [%]	<b>TZ4:</b> Temperatura na Zona 4 [°C]
<b>VA:</b> Vazão de ar [l/min]	<b>TZ5:</b> Temperatura na Zona 5 [°C]
<b>Tx:</b> Temperatura na posição x [°C]	<b>TZ6:</b> Temperatura na Zona 6 [°C]
<b>EA:</b> Excesso de Ar [%]	<b>TZ7:</b> Temperatura na Zona 7 [°C]

**NOx Out:** NOx na Saída do Reator [ppm]

Nota-se o efeito das principais variáveis que interferem nos resultados em cada zona para temperatura dos gases, sendo em termos gerais principalmente o excesso de ar, o percentual de cinza e a temperatura de entrada do ar, para as zonas específicas Z1 à Z7, cada uma sobre influência de determinadas variáveis, conforme descrito a seguir.

A Zona 1 sofre maior influência do excesso de ar de combustão e da temperatura de entrada. Na Zona 2 ocorre a secagem e devolatilização dos voláteis do combustível, e sofre a influência da umidade do combustível e a temperatura da zona anterior. Nas zonas Z2 à Z6 ocorre uma relação entre as temperaturas das zonas anteriores e pequenas interferências do teor de cinzas do combustível e do excesso de ar. A Z7 passa a sofrer interferência externa, reduzindo a temperatura pelos efeitos de radiação e recirculação de ar atmosférico.

Na Tabela 5.4 são apresentadas as equações para a obtenção dos dados de carbono residual (*Char*), obedecendo os mesmos critérios definidos anteriormente.

Tabela 5.4 - Equações do metamodelo para carbono residual (*Char*).

Equações do metamodelo para o DTF - Carbono Residual ( <i>Char</i> )		
		Carbono Residual [%]
	Entrada de combustível e ar	
	Z1	
	1ª Zona do reator	<b>Zona 1</b> $CZ1 = 0,062 T_x - 28,4$
Ponto de análise X = 175 [mm]	Z2	
	2ª Zona do reator	<b>Zona 2</b> $CZ2 = 6,41 EA - 316,3 Cz + 52,6$
Ponto de análise X = 350 [mm]	Z3	
	3ª Zona do reator	<b>Zona 3</b> $CZ3 = 9,14 EA - 255 Cz + 28,6$
Ponto de análise X = 520 [mm]	Z4	
	4ª Zona do reator	<b>Zona 4</b> $CZ4 = 9,13 EA - 75,3 Cz EA - 136,5 Cz + 23,04$
Ponto de análise X = 700 [mm]	Z5	
	5ª Zona do reator	<b>Zona 5</b> $CZ5 = 8,98 EA - 77 Cz EA - 90,4 Cz + 15,63$
Ponto de análise X = 900 [mm]	Z6	
	6ª Zona do reator	<b>Zona 6</b> $CZ6 = 7,01 EA - 153 Cz - 61,6 Cz EA + 19,48$
Ponto de análise X = 1.100 [mm]	Z7	
	7ª Zona do reator	<b>Zona 7</b> $CZ7 = 40,02 - 361 Cz$
Ponto de análise X = 1.300 [mm]	Saída do reator	

**Onde:**

<b>TM:</b> Temperatura Média [°C]	<b>CZ1:</b> Carbono Residual na Zona 1 [%]
<b>TE:</b> Temperatura de Entrada do Ar [°C]	<b>CZ2:</b> Carbono Residual na Zona 2 [%]
<b>UmC:</b> Umidade do Carvão [%]	<b>CZ3:</b> Carbono Residual na Zona 3 [%]
<b>Cz:</b> Cinza do carvão [%]	<b>CZ4:</b> Carbono Residual na Zona 4 [%]
<b>VA:</b> Vazão de ar [l/min]	<b>CZ5:</b> Carbono Residual na Zona 5 [%]
<b>Tx:</b> Temperatura na posição x [°C]	<b>CZ6:</b> Carbono Residual na Zona 6 [%]
<b>EA:</b> Excesso de Ar [%]	<b>CZ7:</b> Carbono Residual na Zona 7 [%]

A correlação entre o excesso de ar e a temperatura surge com maior frequência e relevância nas equações que regem o resultado de carbono residual entre as zonas Z1 à Z3, pois as reações que envolvem a geração e consumo do carbono residual estão fortemente

ligadas à temperatura do ambiente onde a partícula de combustível está exposta. A partir deste ponto, o percentual de cinza do combustível torna-se a variável que mais interfere nos resultados entre as zonas quatro a sete (Z4 à Z7), conforme análise de Pareto.

As equações que determinam o cálculo da fração mássica de cinzas residuais da partícula (*Ash residual*) são apresentadas na Tabela 5.5. A obtenção destes dados possibilita o cálculo da taxa de queima do combustível, obtendo as taxas de *burnout* ao decorrer do reator.

Tabela 5.5 - Equações do metamodelo para fração mássica de cinza na partícula

		Equações do metamodelo para o DTF - Fração de Cinza Residual ( <i>Ash</i> )	
		Ash Residual [%]	
	Entrada de combustível e ar		
	Z1	1ª Zona do reator	<b>Zona 1</b> $AsZ1 = 0,0325 TZ1 + 108 UmC + 247 Cz - 3 UmC Cz - 30,1$
Ponto de análise X = 175 [mm]	Z2	2ª Zona do reator	<b>Zona 2</b> $AsZ2 = 85,42 UmC + 674,1 Cz - 2,337 EA + 623,3 UmC Cz - 15,19 UmC Cz - 75,62 Cz EA - 67,47 UmC Cz EA + 14$
Ponto de análise X = 350 [mm]	Z3	3ª Zona do reator	<b>Zona 3</b> $AsZ3 = 430 Cz - 6,51 EA + 35,3 Cz EA + 45,29$
Ponto de análise X = 520 [mm]	Z4	4ª Zona do reator	<b>Zona 4</b> $AsZ4 = 277,4 UmC + 584,7 Cz - 1,609 EA - 2464 UmC Cz - 39,96 UmC EA + 0,5566 Cz EA + 393 UmC Cz EA + 30,05$
Ponto de análise X = 700 [mm]	Z5	5ª Zona do reator	<b>Zona 5</b> $AsZ5 = 307,7 UmC + 560,1 Cz - 0,9996 EA - 2707 UmC Cz - 45,53 UmC EA - 2,404 Cz EA + 450,3 UmC Cz EA + 34,91$
Ponto de análise X = 900 [mm]	Z6	6ª Zona do reator	<b>Zona 6</b> $AsZ6 = 166,8 UmC + 464 Cz - 1,792 EA - 1182 UmC Cz - 18,73 UmC EA + 12,12 Cz EA + 146,5 UmC Cz EA + 46,12$
Ponto de análise X = 1.100 [mm]	Z7	7ª Zona do reator	<b>Zona 7</b> $AsZ7 = 430,6 Cz + 53,03$
Ponto de análise X = 1.300 [mm]		Saída do reator	

**Onde:**

<b>TM:</b> Temperatura Média [°C]	<b>CZ1:</b> Carbono Residual na Zona 1 [%]
<b>TE:</b> Temperatura de Entrada do Ar [°C]	<b>CZ2:</b> Carbono Residual na Zona 2 [%]
<b>UmC:</b> Umidade do Carvão [%]	<b>CZ3:</b> Carbono Residual na Zona 3 [%]
<b>Cz:</b> Cinza do carvão [%]	<b>CZ4:</b> Carbono Residual na Zona 4 [%]
<b>VA:</b> Vazão de ar [l/min]	<b>CZ5:</b> Carbono Residual na Zona 5 [%]
<b>Tx:</b> Temperatura na posição x [°C]	<b>CZ6:</b> Carbono Residual na Zona 6 [%]
<b>EA:</b> Excesso de Ar [%]	<b>CZ7:</b> Carbono Residual na Zona 7 [%]

Observou-se uma dependência da fração mássica de cinzas residuais na partícula de combustível (*Ash residual*) com os três dados de entrada e suas correlações (umidade, cinzas e excesso de ar), o que impossibilitou a redução do número de parâmetros do modelo, com exceção da última zona (Z7). Essa última zona apresentou dependência do percentual de cinzas do combustível, pois o combustível já estava oxidado em sua maioria nesta região do

reator. As equações que representam estas reações são apresentadas na Tabela 5.5 e denominadas de  $AsZ_n$  (*Ash residual* na Zona  $n$ ).

A Tabela 5.6 apresenta as equações que regem a formação de fuligem em cada zona, denominadas de  $SZ_n$ , (*Soot* na Zona  $n$ ). Para a fuligem, destaca-se a relação com a umidade do combustível e principalmente pelo excesso de ar na combustão.

Tabela 5.6 - Equações do metamodelo para fuligem (*Soot*).

		Equações do metamodelo para o DTF - Fuligem ( <i>Soot</i> )	
		Fuligem ( <i>Soot</i> ) [ppm]	
	Entrada de combustível e ar		
	Z1	1ª Zona do reator	<b>Zona 1</b> $SZ1 = 0,5824 TZ1 + 35,9 UmC + 328,8 Cz - 63,68 EA - 34,79 UmC EA + 441$
Ponto de análise X = 175 [mm]	Z2	2ª Zona do reator	<b>Zona 2</b> $SZ2 = 107,4 UmC - 129,923 EA - 26,1 UmC EA + 1281,07$
Ponto de análise X = 350 [mm]	Z3	3ª Zona do reator	<b>Zona 3</b> $SZ3 = 26,95 Cz EA - 345,1 EA - 300,6 Cz - 1,403 SZ2 + 3151$
Ponto de análise X = 520 [mm]	Z4	4ª Zona do reator	<b>Zona 4</b> $SZ4 = 1321,8 - 146,31 EA$
Ponto de análise X = 700 [mm]	Z5	5ª Zona do reator	<b>Zona 5</b> $SZ5 = 22,5 Cz + 45,84 EA - 63,7 Cz EA + 1090,65$
Ponto de análise X = 900 [mm]	Z6	6ª Zona do reator	<b>Zona 6</b> $SZ6 = 137,1 UmC + 68,81 EA - 23,5 UmC EA + 878,68$
Ponto de análise X = 1.100 [mm]	Z7	7ª Zona do reator	<b>Zona 7</b> $SZ7 = 57,47 EA + 63,2 Cz EA - 426 Cz + 853,94$
Ponto de análise X = 1.300 [mm]	Saída do reator	<b>Fuligem na Saída</b>	<b>Soot Out</b> = $57,47 EA + 63,2 Cz EA - 426 Cz + 853,94$

**Onde:**

<b>TM:</b> Temperatura Média [°C]	<b>SZ1:</b> Fuligem na Zona 1 [ppm]
<b>TE:</b> Temperatura de Entrada do Ar [°C]	<b>SZ2:</b> Fuligem na Zona 2 [ppm]
<b>UmC:</b> Umidade do Carvão [%]	<b>SZ3:</b> Fuligem na Zona 3 [ppm]
<b>Cz:</b> Cinza do carvão [%]	<b>SZ4:</b> Fuligem na Zona 4 [ppm]
<b>VA:</b> Vazão de ar [l/min]	<b>SZ5:</b> Fuligem na Zona 5 [ppm]
<b>Tx:</b> Temperatura na posição x [°C]	<b>SZ6:</b> Fuligem na Zona 6 [ppm]
<b>EA:</b> Excesso de Ar [%]	<b>SZ7:</b> Fuligem na Zona 7 [ppm]

**Soot Out:** Fuligem na saída do reator [ppm]

Nas duas zonas iniciais do reator (Z1 e Z2), o efeito da umidade do combustível é a principal variável de entrada que determina a formação de fuligem nestes locais. Nas zonas subsequentes, o efeito da temperatura tornou-se predominante, sendo representada nas equações pelo excesso de ar. Uma vez geradas as equações unidimensionais que representam as reações escolhidas, a etapa subsequente foi a análise e comparação dos resultados em

comparação com os resultados obtidos pelo CFX e os resultados experimentais de Wang et al., 2014, para o caso de temperatura e *burnout*, conforme seção a seguir.

### 5.3 Resultados obtidos com as equações do metamodelo

Após a geração das equações apresentadas na Seção 5.2, foi realizada a análise e comparação dos resultados frente aos dados conhecidos, obtidos para o carvão betuminoso utilizado nos experimentos de Wang et al., 2014 e com as simulações do CFX do presente trabalho. As composições elementar e imediata para o carvão utilizado, foram apresentadas na Tabela 3.3.

O fluxo do processo de utilização das equações do metamodelo é representado pela Figura 5.5.

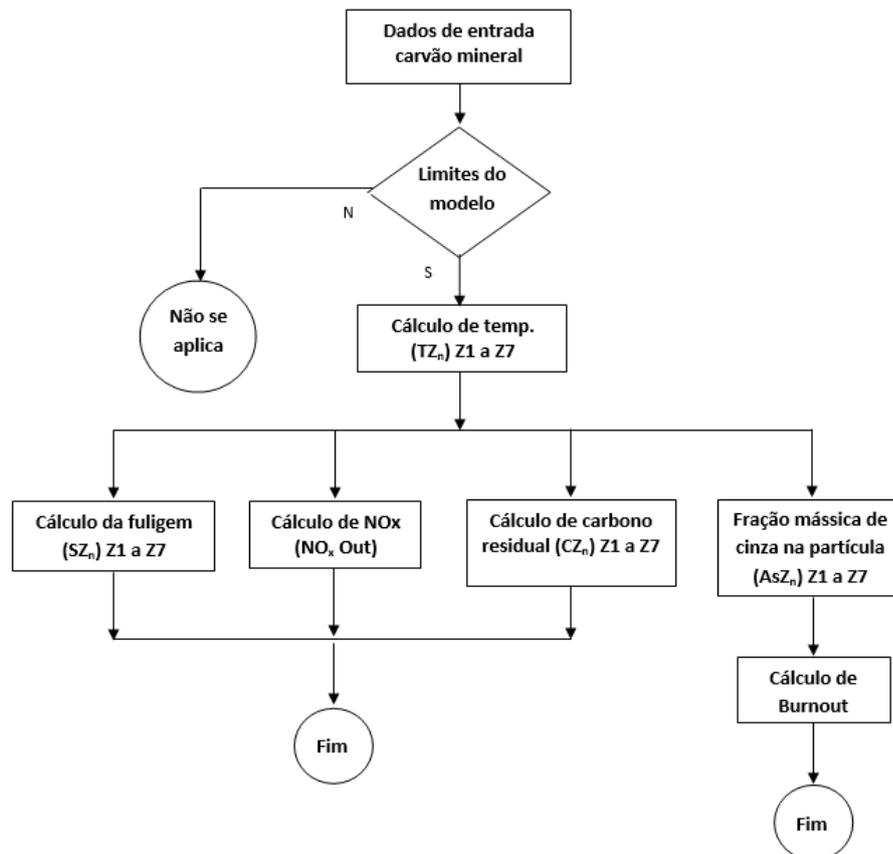


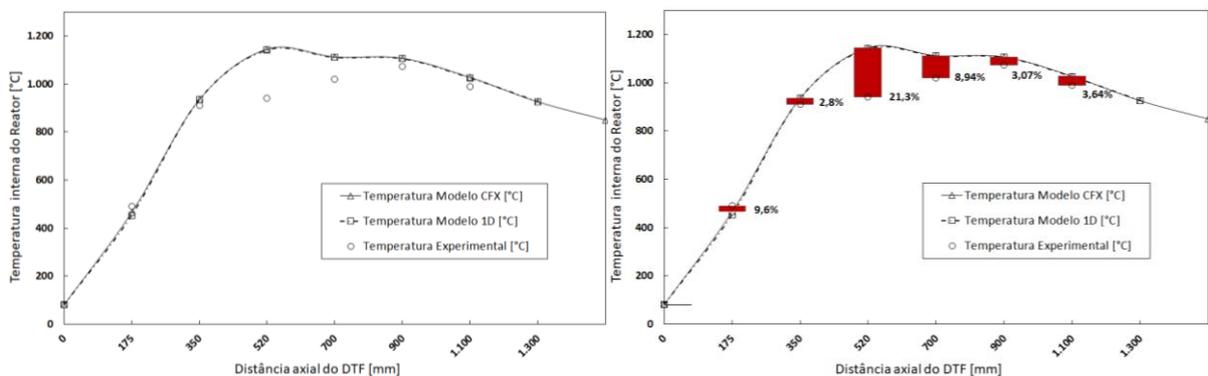
Figura 5.5 - Fluxo do processo de cálculo com as equações do metamodelo.

O fluxo de análise inicia com a verificação dos dados de entrada do carvão, estão dentro dos limites de cálculo do metamodelo, conforme faixas abaixo:

- umidade do carvão entre 1,5 e 12%;
- percentual de cinza entre 1,5 e 10%;
- excesso de ar de combustão entre 120 e 585%;
- carvão bruto (*Raw coal*) entre 78 e 97%.

A primeira variável a ser calculada após a validação dos dados de entrada é a temperatura dos gases em cada zona, seguindo a ordem numérica entre Z1 e Z7 e, na sequência, apresentada no fluxograma apresentado para carbono residual, fração mássica de cinzas na partícula, *burnout*, fuligem e NOx, sucessivamente para cada zona.

A Figura 5.6 apresenta os resultados para a temperatura no interior do reator, obtidos com os três métodos descritos neste trabalho, sendo a linha contínua são dados do CFX<sup>®</sup>, a linha tracejada representa os resultados do metamodelo e os pontos representam os dados experimentais de Wang et al., 2014.



(a) Temperatura na linha axial do reator

(b) Erro em relação ao dado experimental

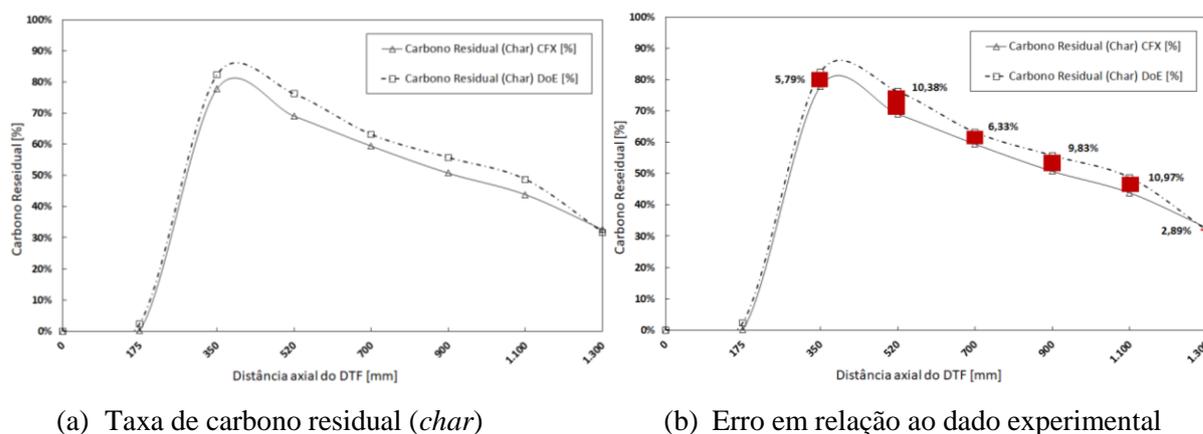
Figura 5.6 - Temperatura na linha de centro do reator, obtida pelo dado experimental, simulação numérica no CFX e o metamodelo.

O desvio médio entre o metamodelo proposto e o CFX foi de 0,18%, com resultados satisfatórios em todos os pontos de análise. O desvio médio entre o metamodelo proposto e os dados experimentais foi de 6,02%, sendo mais significativa a diferença dos resultados na região intermediária do reator, para a qual o desvio chegou a 21,3%. Este desvio também é percebido em relação aos resultados obtidos com o modelo em CFX. Podem-se elencar duas possíveis causas desta diferença: a utilização de dados simulados no CFX para

alimentação do metamodelo e a dificuldade de medição nos experimentos no reator, o que pode causar um desvio na medição de temperatura na zona de queima.

O que se pode destacar aqui é o fato de que as equações do metamodelo são capazes de representar as informações utilizadas como parâmetros de entrada neste modelo, que são altamente complexas e interdependentes, caracterizando-se numa poderosa ferramenta metodológica para o desenvolvimento de códigos numéricos simplificados e infinitamente mais rápidos que os baseados em volumes finitos, inclusive sendo possíveis de rodarem em paralelo a supervisórios de sistemas de controle de plantas industriais, desde que obviamente bem ajustados.

O passo subsequente ao cálculo da temperatura dos gases nas zonas do reator é o cálculo do carbono residual, conforme as equações apresentadas na Tabela 5.4. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 5.7, a qual compara os dados entre o modelo CFX e metamodelo, sem referência com dados experimentais, pois não foram mensurados no trabalho do Wang et al., 2014.



(a) Taxa de carbono residual (*char*)

(b) Erro em relação ao dado experimental

Figura 5.7 - Taxa de *carbono residual* na linha de centro do reator, obtida pela simulação numérica no CFX e o metamodelo.

O desvio médio entre os resultados dos dois modelos foi de cerca de 7,9%, sendo que o metamodelo apresentou resultados mais satisfatórios nas regiões inicial e final do reator, na qual o erro foi de 2,89%. Na região onde predomina a oxidação do carbono residual os resultados obtidos foram em média 8,66% acima da referência utilizada.

As Figura 5.8 (a) e (b) apresentam os resultados obtidos para fração mássica de cinzas na partícula e as Figuras (c) e (d) apresentam as taxas de *burnout* para cada modelo, em comparação com os resultados experimentais de Wang et al., 2014, calculada conforme a

Equação 2.67. O dado de fração de cinzas residuais na partícula é parte necessária para cálculo das taxas de *burnout* em cada ponto e, desta forma, são apresentados em conjunto com os gráficos da taxa de queima do combustível.

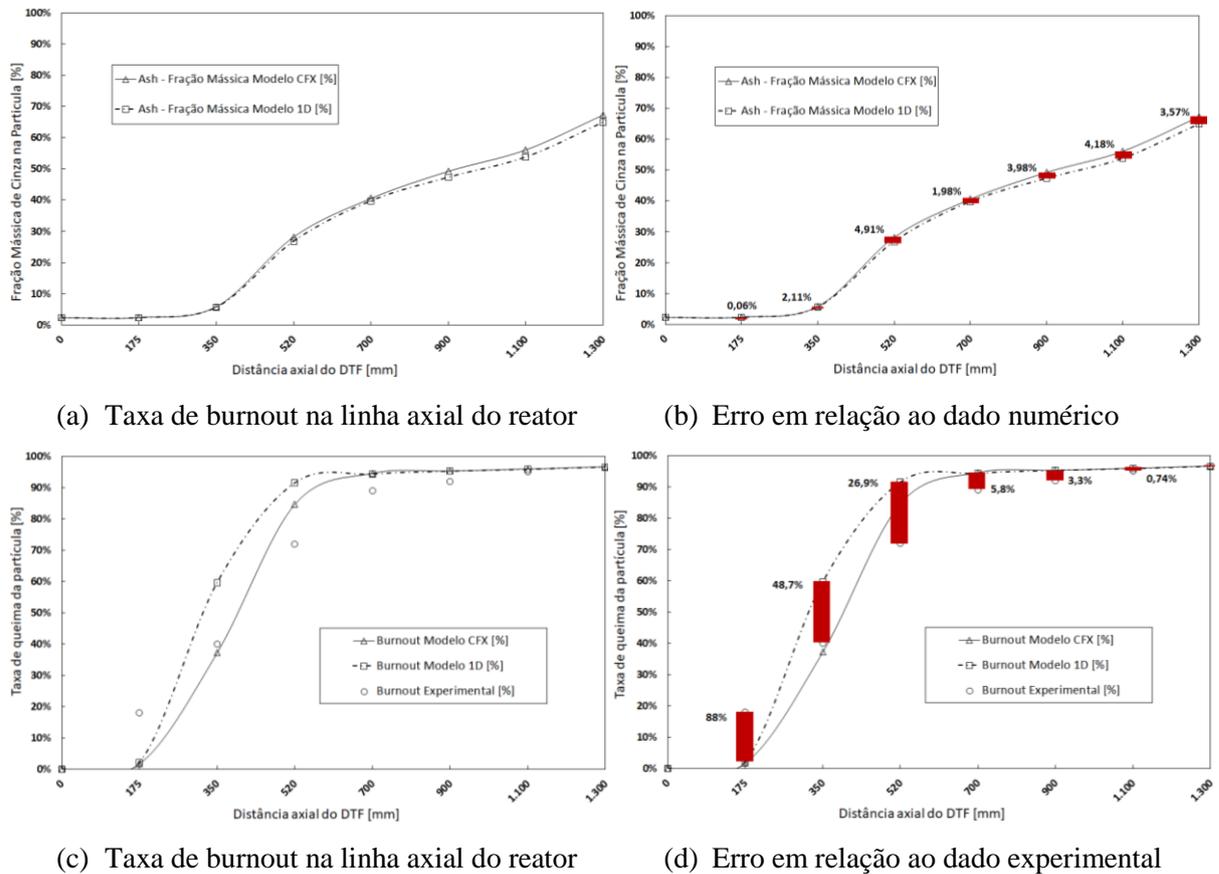


Figura 5.8 - (a) Fração mássica de cinza na partícula (c) Taxas de *burnout* na linha de centro do reator, obtida pelo dado experimental, simulação numérica no CFX e o metamodelo.

O desvio médio para os resultados de cinza residual na partícula foi de 3,58%, conforme apresentado na Figura 5.8 (b), tendo resultados satisfatórios em todas as posições do reator. Para o caso de *burnout* apresentado na Figura 5.8 (b) foi possível comparar os resultados com os dados experimentais, tendo desvio médio de 5,75%. Porém, na região de intermediária do reator, onde ocorre a devolatilização e oxidação de forma mais intensa, o desvio chegou até 48,7%, demonstrando a necessidade de confirmar os dados experimentais, simulações do CFX e metamodelo para a região referida.

Por fim, foram comparados os resultados de ambos os modelos numéricos para a geração de fuligem ao longo do reator, conforme representado na Figura 5.9.

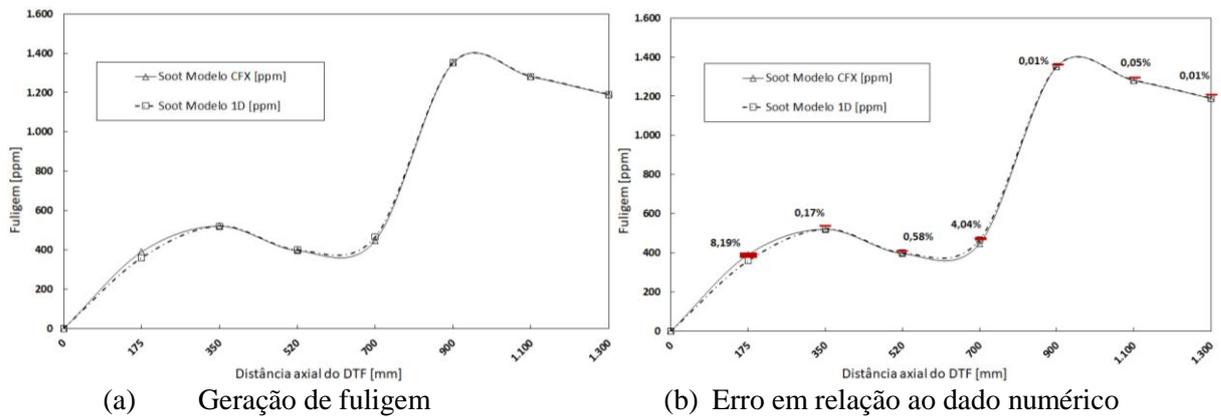


Figura 5.9 - (a) Geração de fuligem durante o processo de combustão do carvão, calculado com modelos numéricos no CFX e o metamodelo, (b) Erro em relação ao dado numérico do CFX.

A comparação dos resultados de fuligem obtidos pelo metamodelo em relação ao modelo completo do CFX<sup>®</sup> apresentou desvio médio de 0,21% e erro máximo de 8,19% na região de entrada do reator.

A seguir são apresentados os resultados pelos dois métodos numéricos, comparando os resultados obtidos pelo CFX e pelo metamodelo para temperatura e fuligem ao longo do reator, relativos à campanha de vinte e sete simulações. Foram selecionados nove casos, variando excesso de ar, teor de cinzas e umidade do combustível, conforme Figuras 5.10 e 5.11.

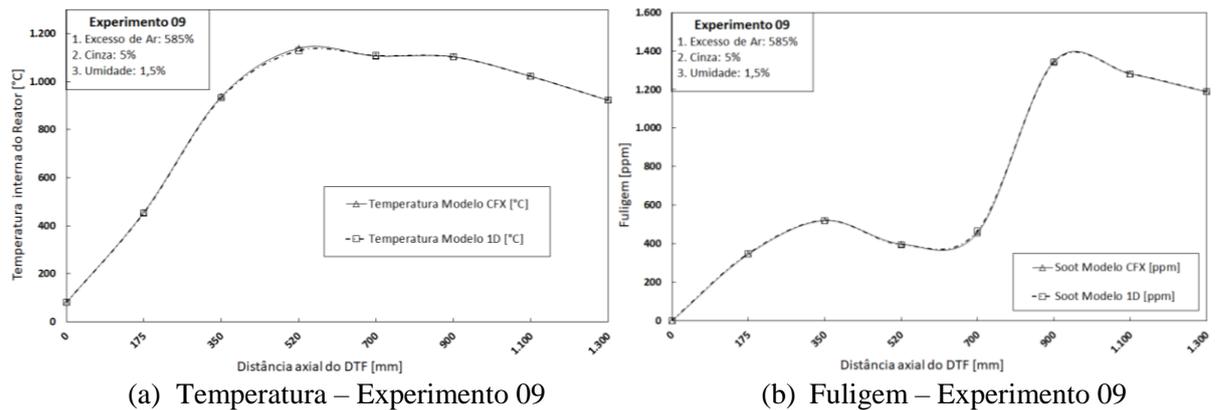
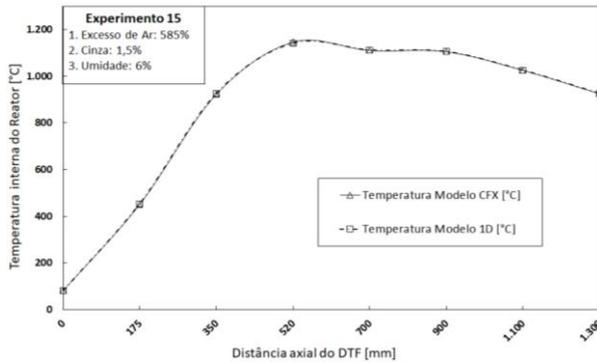
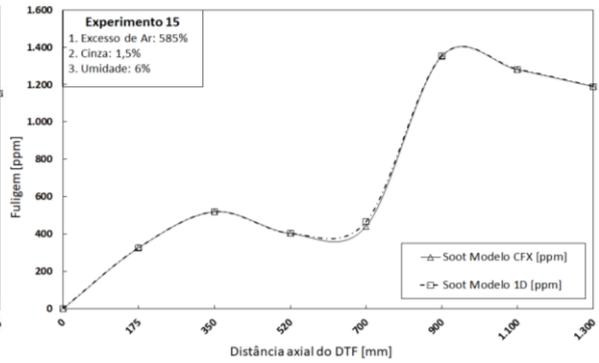


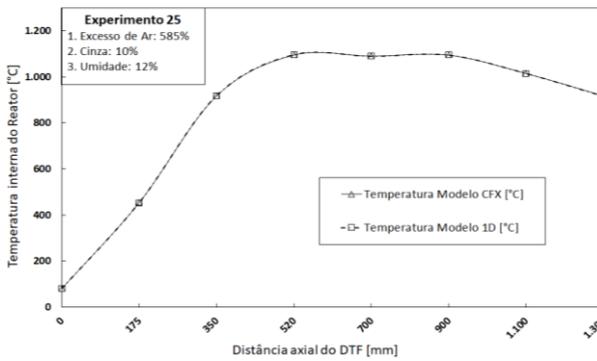
Figura 5.10 - Comparação dos resultados obtidos com os métodos numéricos CFD e o metamodelo para temperatura e fuligem – Experimento 09.



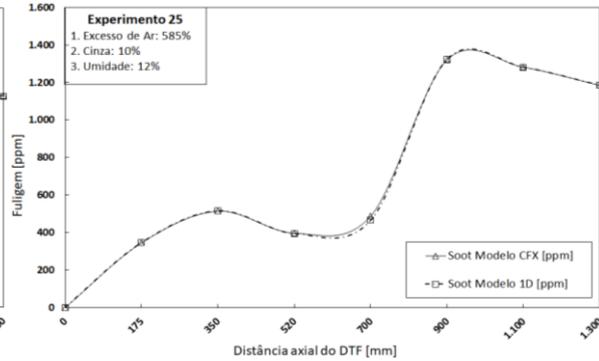
(c) Temperatura – Experimento 15



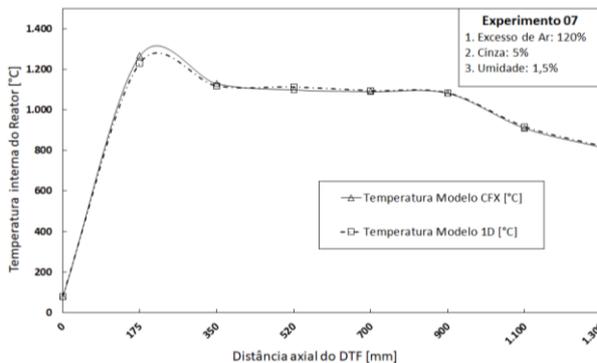
(d) Fuligem – Experimento 15



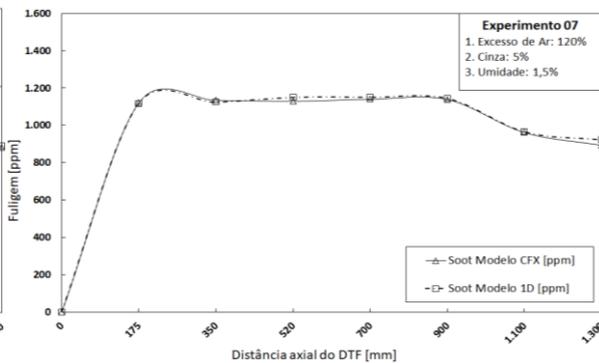
(e) Temperatura – Experimento 25



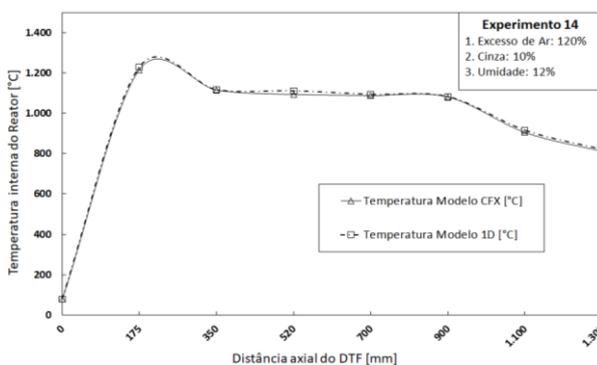
(f) Fuligem – Experimento 25



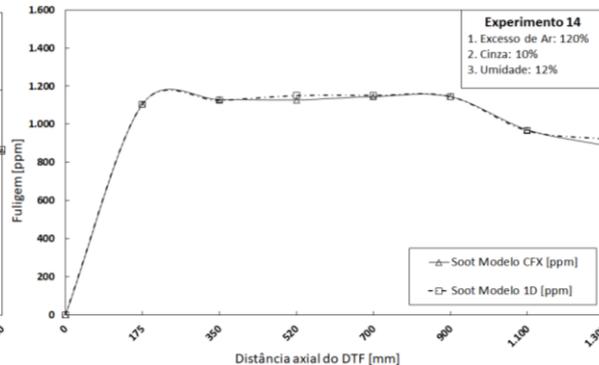
(g) Temperatura – Experimento 07



(h) Fuligem – Experimento 07

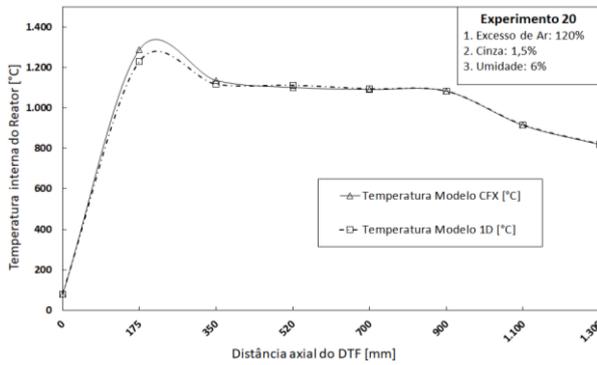


(i) Temperatura – Experimento 14

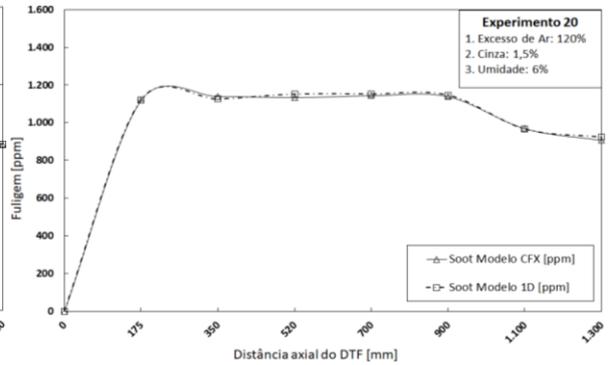


(j) Fuligem – Experimento 14

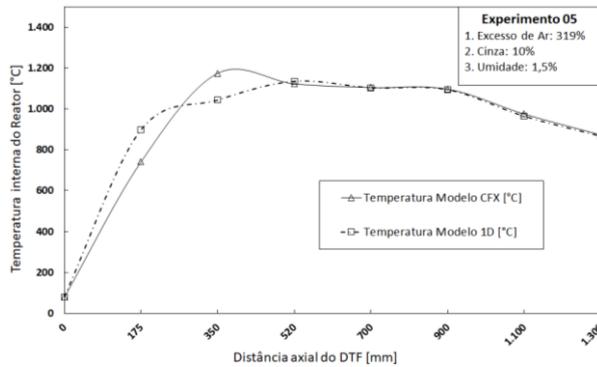
Figura 5.11 - Comparação dos resultados obtidos com os métodos numéricos CFD e o metamodelo para temperatura e fuligem – Experimentos 07, 14, 15 e 25.



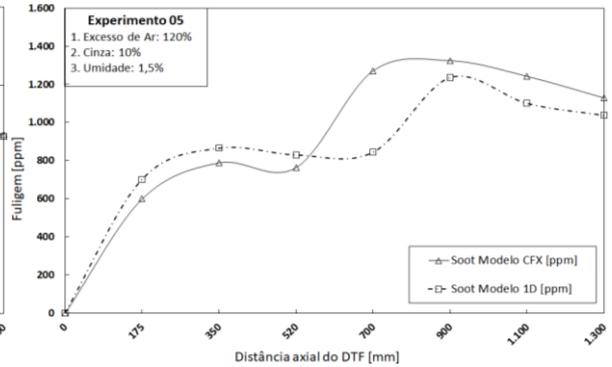
(k) Temperatura – Experimento 20



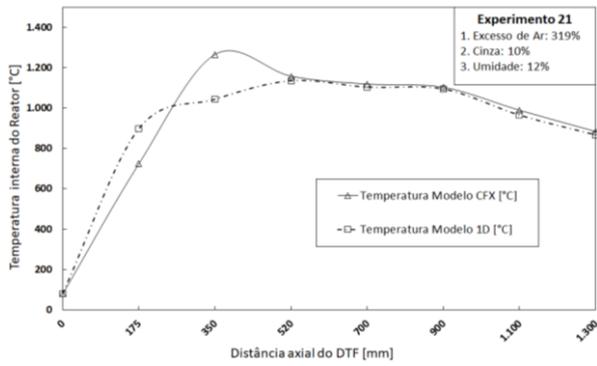
(l) Fuligem – Experimento 20



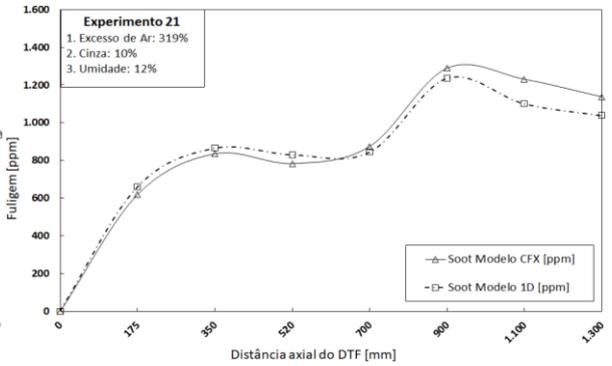
(m) Temperatura – Experimento 05



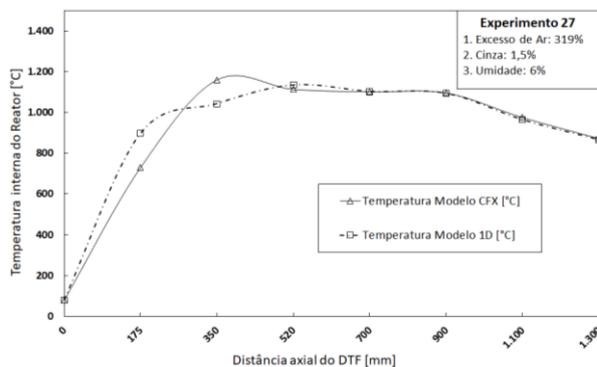
(n) Fuligem – Experimento 05



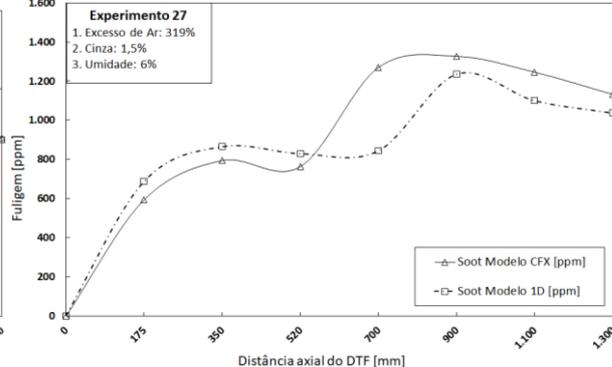
(o) Temperatura – Experimento 21



(p) Fuligem – Experimento 21



(q) Temperatura – Experimento 27



(r) Fuligem – Experimento 27

Figura 5.12 - Comparação dos resultados obtidos com os métodos numéricos CFD e o metamodelo para temperatura e fuligem – experimentos 05, 20, 21 e 27.

De forma geral, pode-se concluir que as equações geradas com o método do DoE podem representar de forma satisfatória e ágil os principais resultados analisados, e que a metodologia desenvolvida e aplicada neste trabalho apresenta-se com uma importante ferramenta para avaliação e monitoramento de sistemas térmicos, como caldeiras, fornos, reatores, etc.

#### 5.4 Resumo do método desenvolvido para obter o metamodelo

Para a obtenção do metamodelo foi desenvolvida e aplicada uma metodologia que envolveu dados experimentais, simulações numéricas em CFD, validação dos resultados numéricos, aplicação do DoE para obtenção das campanhas de simulações, geração das equações do metamodelo e, por fim, a validação dos resultados obtidos. A Figura 5.13 apresenta o fluxograma das etapas percorridas para a geração dos resultados apresentados na seção anterior.

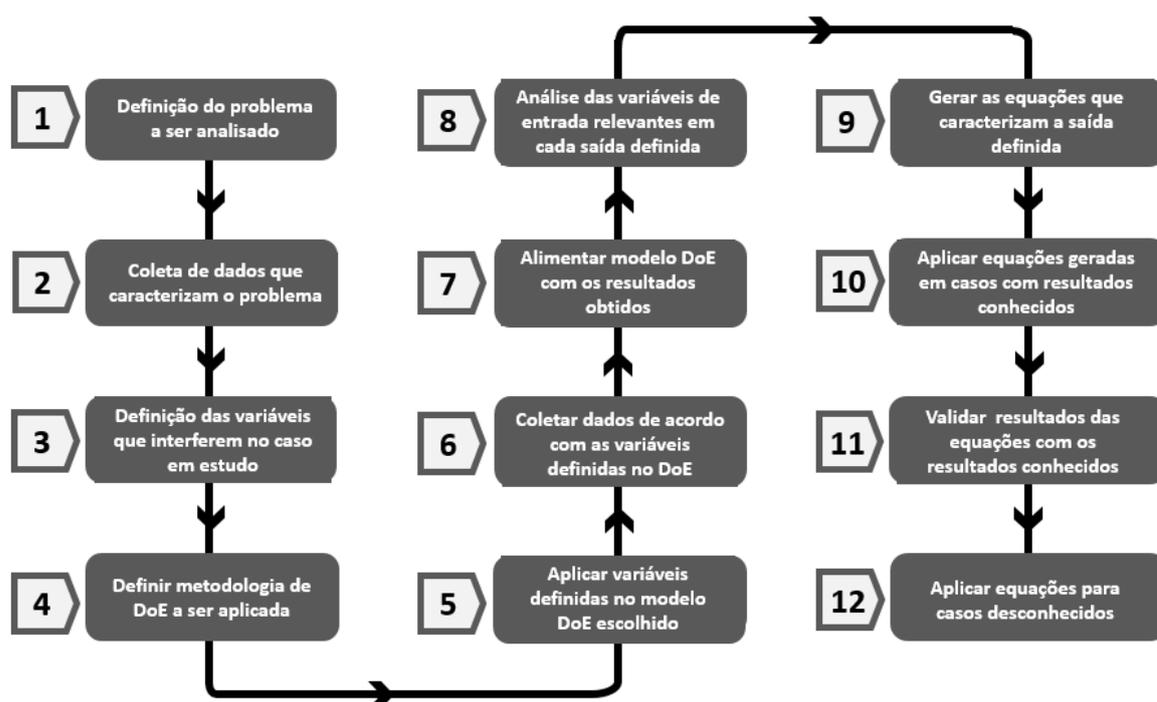


Figura 5.13 - Fluxograma desenvolvido para simplificar o modelo numérico.

O processo a ser analisado possui as doze principais etapas apresentadas no fluxograma, porém existem outras de menor relevância e que estão intrínsecas aos principais passos e que são descritas nos itens a seguir:

1. caracterização do problema a ser resolvido, avaliando as condições de entrada, contorno e resultados de saída desejados. Nesta etapa, deve-se analisar com critérios estabelecidos quais serão os principais dados de saída a serem estudados;
2. coleta de dados experimentais e/ou numéricos confiáveis que caracterizam o processo em análise;
3. avaliar quais são as principais variáveis que interferem nos resultados finais e suas faixas. As variáveis alimentam o DoE e estabelecem a campanha de simulações e ou experimentos a serem realizados. Ressalta-se que quanto maior o número de variáveis de entrada, maior será a quantidade de dados a serem coletados, de acordo com a metodologia DoE aplicada;
4. Definição da metodologia de DoE a ser aplicada entre os modelos estatísticos existentes, como: fatorial, fatorial completo, superfície de resposta, entre outros disponíveis e que devem ser avaliados de acordo com as características e variáveis do problema em análise;
5. criação do experimento em softwares que possuem o método estatístico
6. coleta dos dados de acordo com a campanha de experimentos definidos na etapa anterior.;
7. alimentação o modelo DoE com todas as informações obtidas na campanha de experimentos;
8. análise dos dados inseridos no modelo DoE visando identificar as principais variáveis de entrada que interferiram na saída específica. Também sugere-se analisar as covariáveis que podem interferir no resultado, sendo esta uma rotina de seleção no modelo DoE. A geração do gráfico de Pareto auxilia na identificação das variáveis de entrada de maior relevância para cada resultado, podendo simplificar as equações de regressão, com a exclusão de variáveis de entrada de baixa interferência, conforme apresentado na Figura 5.3;
9. geração das equações que representam a variável de saída, obtidas por regressão das informações de entrada do modelo (variáveis, covariáveis e resultados experimentais) que caracterizam o problema em estudo. As

equações são geradas para cada saída específica, definida na primeira etapa do processo;

10. aplicação as equações obtidas no DoE em casos com os resultados conhecidos, com as variáveis de entrada dentro da faixa definida na terceira etapa. No presente trabalho foram utilizadas duas formas de comparação dos resultados, sendo a primeira a comparação entre o modelo CFD e o metamodelo; e na segunda, o metamodelo com os dados experimentais de Wang et al., 2014;
11. sugere-se que nesta etapa do processo ocorra a validação dos resultados entre os modelos, utilizando-se como referência um experimento com resultados conhecidos. Importante analisar o erro entre os modelos e verificar se os resultados com o metamodelo são aceitáveis para cada caso;
12. caso a validação dos resultados entre os modelos esteja com desvios aceitáveis, o modelo pode ser aplicado para problemas desconhecidos e com dados de entrada dentro das faixas delimitadas na etapa três. A Figura 5.5 apresenta os passos para a aplicação do modelo desenvolvido no presente trabalho.

O processo desenvolvido e aplicado no presente trabalho serviu para simplificar um modelo numérico em CFD de alta complexidade e elevado tempo de processamento para um metamodelo de fácil aplicação, entendimento e capaz de fornecer resultados satisfatórios para a necessidade específica na qual foi desenvolvido. Desta forma, este processo pode ser replicado a outros problemas de engenharia, que possuam elevado grau de dificuldade e tempo de resolução.

Pode-se destacar algumas vantagens da aplicação deste modelo, como:

- identificação de forma rápida e estruturada das principais variáveis de cada problema;
- simplificação dos modelos numéricos;
- otimização de tempo de processamento;
- pode ser aplicado e resolvido sem a necessidade de processadores de elevado desempenho;
- facilidade de entendimento e operação das ferramentas;

- obtém resultados satisfatórios, quando comparado com outras ferramentas mais complexas;
- pode ser aplicado a diversos problemas de engenharia, que possuam elevada quantidade de variáveis;

Portanto, a aplicação do método de *Design of Experiments* pode ser uma ferramenta adicional na análise e solução dos problemas complexos de engenharia, amplificando a análise e direcionando a atenção para as variáveis de maior relevância.

## 6 CONCLUSÕES

A modelagem computacional de combustíveis sólidos fornece uma ferramenta valiosa que pode ser usada para a investigação e melhor compreensão dos fenômenos envolvidos em um processo de combustão. Dois modelos numéricos para a previsão do processo de combustão de carvão foram desenvolvidos, validados e apresentados neste trabalho. O primeiro modelo numérico foi implementado no código comercial CFX<sup>®</sup> de CFD (*Computational Fluid Dynamics*), e o segundo, utilizando a metodologia DoE (*Design of Experiments*), para gerar um metamodelo capaz de reproduzir os principais resultados gerados pelo modelo completo em CFD.

Os estudos numéricos foram conduzidos em um forno de queda livre - DTF (*Drop Tube Furnace*), um equipamento capaz de aproximar em escala laboratorial as condições de queima dos combustíveis sólidos, tais como altas temperaturas, elevadas taxas de aquecimento (na ordem de  $10^4$ °C/s), tempo de residência controlados, e assim obter informações necessárias para análise de parâmetros cinéticos, eficiência de queima, devolatilização, combustibilidade, análise de emissões geradas e deposição de cinza em superfícies. O DTF admite a queima de mistura de combustíveis em regime de coqueima, em condições próximas a de processos em grande escala. A simulação da combustão no CFX<sup>®</sup> empregou os modelos para escoamento RANS (*Reynolds Averaged Navier Stoks*), combustão EDM/FRC (*Eddy Dissipation Model e Finite Chemistry Model*), trajetória das partículas de forma lagrangeana, modelo de turbulência  $k-\omega$ , secagem do combustível através do modelo proposto por Brydem/Xianchun, devolatilização do carvão, formação e combustão de fuligem de acordo com o modelo proposto por Magnussen e, por fim, modelo de radiação DTRM (*Discrete Transfer Radiation Model*), integrando ao WSGG (*Weighted Sum of Gray Gases*) com os efeitos da fuligem.

Os resultados obtidos foram comparados com os dados experimentais disponibilizados por Wang et al., 2014 apresentando desvios médios de 1,65% para temperatura e de 3,2% para os resultados de *burnout*. Os resultados obtidos mostram que o modelo desenvolvido para simular o comportamento do DTF é eficaz e pode ser uma ferramenta auxiliar para caracterização do comportamento das reações envolvidas na combustão de carvão, fornecendo resultados compatíveis com a física real do problema.

O CFD permitiu obter dados adicionais aos que usualmente são coletados nos experimentos, como a trajetória e temperatura da face da partícula, início do processo de devolatilização, tipo de gases devolatilizados e em que região ocorre a combustão, formação, combustão e interferência da fuligem. Desta forma, o presente trabalho possibilitou a análise destes efeitos no processo de combustão de carvão, conforme descritos a seguir.

Identificou-se que a secagem e devolatilização dos voláteis do carvão ocorrem na etapa de aquecimento até os 260mm da entrada do reator, com tempo de residência das partículas de 297ms. Devido ao baixo diâmetro da partícula utilizado neste trabalho (diâmetro médio de 55 $\mu$ m), as etapas de secagem e devolatilização ocorrem em sequência, visto que a temperatura na face e no centro das partículas são idênticas. Para as partículas de maior tamanho (>1mm), o efeito de condução térmica interfere no processo de secagem e devolatilização, fazendo com que estas etapas ocorram simultaneamente, causado pelo gradiente de temperatura entre a face e o centro da partícula.

Observou-se o início do processo de devolatilização do carvão quando a face da partícula atingiu a temperatura de 394,4°C, baseado no surgimento das primeiras moléculas de CO e CH<sub>4</sub>, seguido pela sua oxidação. A finalização do processo de devolatilização ocorre a 307mm da entrada do reator e com a temperatura da partícula a 742,06°C, tendo tempo de permanência nesta etapa de 197ms. Outra característica da etapa de devolatilização dos voláteis no carvão é o balanço de energia nulo, sendo que a energia disponibilizada pela oxidação dos voláteis é igual a energia necessária para formação das demais espécies que compõem a devolatilização. A etapa de oxidação do carbono residual é caracterizada por reações exotérmicas, com elevação da temperatura dos gases.

A etapa de oxidação do carbono residual ocorreu em sequência a etapa anterior, sendo identificada pela formação do carbono residual e também pela proximidade que a temperatura da partícula atinge em relação à temperatura dos gases, sendo que em alguns momentos é superior à dos gases. Este é um comportamento característico desta etapa da combustão de carvão e ocorre devido a superfície porosa da partícula, o que resulta em reações de combustão na face e também nos poros, elevando a temperatura na superfície. A etapa de oxidação teve um tempo total de duração de 826ms, sendo este 4,2 vezes superior ao tempo de devolatilização dos voláteis.

Outro aspecto importante a ser analisado na combustão de combustíveis sólidos é a formação de fuligem, que atingiu níveis de 1.350ppm. A formação da fuligem teve início

concomitante com a etapa de secagem e devolatilização, sendo intensificada após a elevação da temperatura acima dos 1.100°C e tempo de residência superior a 950ms. Após a nucleação e formação da fuligem, observou-se um leve declínio dos níveis medidos ao final do reator, gerados pelas reações de combustão que estas partículas sofrem.

O modelo numérico em CFD demanda conhecimento dos *softwares* ou em capacidade de computadores para resolução. Visando reduzir esta dificuldade de obtenção de resultados, foi desenvolvido, aplicado e validado um metamodelo que permite obter resultados de forma ágil para a temperatura dos gases de combustão, carbono residual, fração mássica de cinza na partícula, fuligem e NOx. A construção desses metamodelos foi realizada com metodologia estatística de *Design of Experiments* DoE a partir de resultados de simulação de CFD para faixas dos parâmetros de umidade, cinza, excesso de ar e carvão bruto.

O modelo tem validade limitada aos tipos de carvão mineral que estejam dentro da faixa na qual foi desenvolvido, o carvão do tipo betuminoso, com percentual de cinzas entre 1,5 a 10%, umidade entre 1,5 e 12 % e com combustão com excesso de ar entre 120 a 585%.

O desvio médio para temperatura dos gases de combustão entre os resultados do metamodelo e do CFD foi de 0,18%, e de 6,02% em respeito aos dados experimentais, mas esse último caso com desvio de 21,3% na região intermediária do DTF. A diferença em relação aos experimentos pode ser justificada também por eventuais desvios durante a aquisição de dados. O desvio médio para os resultados do teor de cinzas residuais na partícula foi de 3,58% em comparação com os dados numéricos, e com resultados satisfatórios em todas as posições do reator. Este dado serve de entrada para o cálculo de *burnout* e, desta forma, possível de ser comparada com os experimentos, o qual resultou em um desvio médio de 5,75%, sendo aceitável em relação ao experimento. Porém, na região de intermediária do reator, onde ocorre a devolatilização e oxidação de forma mais intensa, o desvio chegou até 48,7%, apresentando a necessidade de confirmar os dados experimentais, simulações no CFD e por fim o metamodelo para a região referida. Para o caso de fuligem, o metamodelo obteve resultados bem satisfatórios, com desvio médio de 0,21% e erro máximo de 8,19% na região de entrada do reator.

Conforme resultados obtidos entre os modelos numéricos analisados, pode-se concluir que os metamodelos desenvolvidos por esta metodologia aqui aplicada representam de forma coerente e condizente as reações físicas e químicas que ocorrem nas em processos

de combustão, além de serem possíveis de se aplicar a outros problemas complexos de engenharia. Neste sentido, o presente trabalho apresentou uma metodologia bastante eficiente para a construção de modelos unidimensionais, que pode ser replicada em outros problemas semelhantes.

## **6.1 Sugestões para próximos trabalhos**

Sugerem-se os seguintes pontos:

- a) comparar resultados dos modelos numéricos com os dados experimentais do reator da UFRGS;
- b) aplicar a metodologia DoE utilizando os dados experimentais para geração das equações e verificar se é necessário ajuste no modelo CFD;
- c) aplicar a metodologia apresentada para obtenção de metamodelo sem equipamentos industriais como fornalhas, caldeiras, reatores, etc., a fim de verificar sua capacidade de solução e simplificação;
- d) direcionar áreas de pesquisa para armazenamento de energia e transição energética.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abbas T., Costen P., Lockwood F.C. e Romo-Millares C.A. The effect of particle size on NO formation in a large-scale pulverized coal-fired laboratory furnace: measurements and modeling. **Combustion and Flame**, vol. 93, p. 316-326, 1993.

ANEEL. Agência Nacional de Energia Elétrica. Carvão Mineral, 2016. **Distribution Repository**. [http://www2.aneel.gov.br/arquivos/pdf/atlas\\_par3\\_cap9.pdf/](http://www2.aneel.gov.br/arquivos/pdf/atlas_par3_cap9.pdf/), Acesso em: 15-08-2018;

ANSYS Inc. User's guide - **CFX Solver Theory**, 2013.

Asotani T., Yamashita T., Tominaga H., Uesugi Y., Itaya Y. e Mori S. Prediction of ignition behavior in a tangentially fired pulverized coal boiler using CFD. **Fuel**, vol. 87, p. 482-490, 2008.

Backreedy R.I., Jones J.M., Ma, L., Pourkashanian M., Williams A., Arenillas A., Arias B., Pis J.J. e Rubiera F. Prediction of unburned carbon and NO<sub>x</sub> in a tangentially fired power station using single coals and blends. **Fuel**, vol. 84, p. 2196-2203, 2005.

Bosoaga A., Panoiu N., Mihaescu L., Backreedy R.I., Ma L., Pourkashanian M. e Williams A. The combustion of pulverized low grade lignite. **Fuel**, vol. 85, p. 1591-1598. 2006.

Bryden K.M., Ragland K.W. e Rutland C.J. Modeling thermally thick pyrolysis of wood. **Biomass and Bioenergy**, vol. 22, p. 41-53, 2002.

Brown W.K. Derivation of the Weibull distribution based on physical principles and its connection to the Rosin-Rammler and lognormal distributions. **Journal of Applied Physics**, vol. 78, p. 2758-2763, 1995.

Brown P. e Caldeira K. Greater future global warming inferred from Earth's recent energy budget. **Nature**, vol 552, p. 45–50, 2017.

Carvalho M.G., Farias T. e Fontes P. Predicting Radiative Heat Transfer in Absorbing, Emitting and Scattering Media Using the Discrete Transfer Method. **ASME HTD**, vol. 160, p. 17-26, 1991.

Cassol F., Brittes R., França F.H.R, Ofodike A. e Ezekoye A., Application of the weighted-sum-of-gray-gases model for media composed of arbitrary concentrations of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> and soot. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 79, p. 796-806, 2014.

Centeno F.R. **Modelagem da Radiação Térmica em chamas turbulentas da combustão de metano em ar**. 2014. 204 f. Tese (Doutorado em Engenharia) – Programa de Pós-graduação em engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2014.

Centeno F.R., Brittes R., França F.H.R, Silva C.V. Application of the WSGG model for the calculation of gas-soot radiation in a turbulent non-premixed methane-air flame inside a cylindrical combustion chamber. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 93, p. 742-753, 2016.

Coelho P.J., Carvalho, M.G., Evaluation of a Three-Dimensional Model for the Prediction of Heat Transfer in Power Station Boilers. **International Journal of Energy Research**, vol. 19, p. 579-592, 1995a

Coelho P.J. e Carvalho M.G. Modeling of Soot formation and Oxidation in turbulent diffusion flames. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, vol. 9, n. 4, p. 644-652, 1995b.

Conrado E., Felipetto L.L., Gatti G.M. e Silva C.V., Influence of particle size in a pulverized coal combustion process of a real 160 MW power plant's boiler. **COBEM** 2015.

Crnomarkovic N., Sijercic M., Belosevic S., Tucakovic D. e Zivanovic T. Numerical Investigation of processes in the lignite-fired furnace when simple gray gas and weighted sum of gray gases models are used. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 56, p. 197-205, 2013

Czernichowski-Laurriol I., Ehinger A. e Thybaud N. CO<sub>2</sub> Capture and Storage in the Sub-surface – A Technological Pathway for Combating Climate Change, 2007.

Di Blasi C. Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars. **Process in Energy and Combustion Science**, vol. 35, p. 121-140, 2009.

Di Blasi C. e Branca C. Kinetics of primary product formation from wood pyrolysis. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, vol. 40, p. 5547-5556, 2001.

Dong C., Yang Y., Yang R. e Zhang J. Numerical modeling of the gasification based biomass co-firing in a 600 MW pulverized coal boiler. **Applied Energy**, vol. 87, p. 2834-2838, 2010.

Dorigon L. J., Duciak G., Brittes R., Cassol F., Galarça M. e 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**, vol. 64, p. 863-873, 2013.

Duan L., Duan Y., Zhao C. e Anthony, E.J. NO Emission during cofiring coal and biomass in oxy fuel circulating fluidized bed combustors. **Fuel**, vol. 150, p. 8-13, 2015.

Eaton A.M., Smoot L.D., Hill S.C. e Eatough C.N. Components, formulations, solutions, evaluations, and application of comprehensive combustion models. **Progress in Energy and Comb.Sci.**, vol. 25, p. 387-436, 1999.

ESSS.Engineering Simulation and Scientific Software. **Distribution Repository**. <http://www.esss.com.br/blog/2016/07/reacao-de-combustao>, Acesso em: 03-10-2017.

Felske J.D. e Charalampopoulos T.T. Gray Gas Weighting Coefficients for Arbitrary Gas-Soot Mixtures, **Int. J. Heat Mass Transfer**, vol. 25, p. 1849-1855, 1982.

Filkoski R.V. Pulverised Coal Combustion with Staged Air Introduction: CFD Analysis with Different Thermal Radiation Methods, **The Open Thermodynamics Journal**, vol. 4, p. 2-12, 2010.

Gubba S.R., Ingham D.B., Larsen K.J., Ma, L., Pourkashanian M., Tan H.Z., Williams A. e Zhou H. Numerical modelling of the cofiring of pulverised coal and straw in a 300 MWe tangentially fired boiler. **Fuel Processing Technology**. vol. 104, p. 181-188, 2012.

Grieco E. e Baldi G. Analysis and modelling of wood pyrolysis. **Chemical Engineering Science**, vol. 66, p. 650-660, 2011.

Guo J, Liu Z, Wang P, Huang X, Li J, Xu P, Zheng C. Numerical investigation on oxy-combustion characteristics of a 200 MW e tangentially fired boiler. **Fuel**, vol. 140, p. 660-668, 2015;

Haseli Y., Van Oijen J.A. e De Goey L.H.P. Modeling biomass particle pyrolysis with temperature-dependent heat of reactions. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, vol. 90, p. 140-154, 2011a.

Haseli Y., Van Oijen J.A. e De Goey L.H.P. Numerical study of the conversion time of single pyrolyzing biomass particles at high heating conditions. **Chemical Engineering Journal**, vol. 169, p. 299-312, 2011b.

Haseli Y., Van Oijen J.A. e De Goey L.H.P. A detailed one-dimensional model of combustion of a woody biomass particle. **Bioresource Technology**, vol. 102, p. 9772-9782, 2011c.

Hobbs M.L., Radulovic P.T. e Smoot L D. Modeling fixed-bed coal gasifiers. **AIChE Journal**, vol. 38, p. 681-702, 1992.

Hottel H.C. e Sarofim A.F. **Radiative Transfer**. McGraw-Hill, 1967.

Incropera F.P., Dewitt D.P., Bergman T.L. e Lavine A.S., **Fundamentos de transferência Calor e de Massa**. 6ª ed. Rio de Janeiro - RJ: LTC, 2008.

IEA - International Energy Agency - IEA 2012.

IPCC Climate Change 2014, Forth **IPCC Assessment Report, 2014**.

Karlstron O., Dirbera M.J., Costa M., Brink A. e Mikko H. Influence of K/C ratio of biomass chars, **Energy & Fuels**, 2017.

Kazanç F., Khatami R., Crnkovic P.M. e Levendis Y. Emissions of NO<sub>x</sub> from coals of various ranks, bagasse and coal-bagasse blends burning in O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> environments. **Energy & Fuels**, 2011.

Khan I.M. e Greeves G. A method for calculation the formation and combustion of soot in diesel. **N.H AFGAN e J.M. BEER, editors, Heat Transfer in Flame**. Cap.25, Scripta, Washington DC, 1974.

Klippel N e Nussbaumer, T. Health relevance of particles from wood combustion incomparison to diesel soot. Proceedings of the 15th Biomass Conference, Paper W1612, Berlin 2007.

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

Kurose R., Makino H. e Suzuki A. Numerical analysis of pulverized coal combustion characteristics using advanced low-NO<sub>x</sub> burner. **Fuel**, vol. 83, p. 693-703. 2004.

Launder B.E. 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**, vol. 19, p. 519-524, 1974.

Li J., Brzdekiewicz A., Yang W. e Blasiak W. Cofiring based on biomass torrefaction in a pulverized coal boiler with aim of 100% fuel switching. **Applied Energy**, Sweden, vol. 99, p. 344-354, 2012.

Lu H., Robert W., Peirce G., Ripa B. e Baxter L.L. Comprehensive study of biomass particle combustion. **Energy & Fuels**, vol. 22, p. 2826-2839, 2008.

Magnussen B.F. e Hjertager B.H. Mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In: PROC. OF THE 16TH Int. **Symp. on Comb.**, Comb. Inst, p. 719-729, 1976.

Makhviladze G.M., Roberts J.P. e Yakush S.E. Fireball During Combustion of Hydrocarbon Fuel Releases. II. Thermal Radiation, **Combustion, Explosion and Shock Waves**, vol. 35, N° 4, 1999.

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

Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA Journal**, vol. 32, n. 8, 1994.

Mortari D.A. **Emprego de Análise Térmica e Forno Tubular de Queda Livre (DTF) para Estudar a Eficiência Térmica de Carvões Minerais, Bagaço de Cana-de-Açúcar e suas Misturas**. Tese (Doutorado em Engenharia) Programa de Pós-Graduação de Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Térmica e Fluidos, USP, São Paulo, 2015.

Mossi A.C., Galarça M.M., Brittes R., Vielmo H.A. e França F.H.R. Comparison of spectral models in the computation of radiative heat transfer in participating media composed of gases and soot. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, vol. 159, p. 112-119, 2012.

Naser J. e Bhuiyan A.A. Numerical modelling of oxy fuel combustion, the effect of radiative and convective heat transfer and burnout. **Fuel**, vol. 139, p. 268–284, 2015a.

Naser J. e Bhuiyan A.A. Computational modelling of cofiring of biomass with coal under oxy-fuel condition in a small scale furnace. **Fuel**, vol. 143, p. 455–466, 2015b.

Niemela N. Computational fluid dynamics modeling of pulverized biomass combustion using optimized reactivity parameters, 2016;

OECD/IEA, World Energy Outlook 2012, International Energy Agency, 2012;

Patakar S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere, Washington, DC, 1980.

Pohlmann J.G. **Avaliação da Combustibilidade e Reatividade de Biomassas Termicamente Tratadas e Carvões com Vistas à Injeção em Alto-Fornos**. Tese

(Doutorado em Engenharia) Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas Metalúrgica e de Materiais PPGE3M, UFRGS, Porto Alegre, 2014.

Ragland K.W. e Aerts D.J. Properties of wood for combustion analysis. **Bioresource Technology**, vol. 37, p. 161-168, 1991.

Roache P.J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. **Journal of the Energy Institute**, p. 116-150, 1994.

Rohloff C.C. **Estudo Comparativo de Queima de Carvão e Biomassa em Forno DTF**. Tese (Mestrado em Engenharia) Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2017.

Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R., Goldman A., Perevalov V.I., Tashkun S.A. e Tennyson J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 111, p. 2139-2150, 2010.

Sami M., Annamalai K e Wooldridge M. Cofiring of coal and biomass fuel blends. **Fuel**, Texas, vol. 27, p. 171-214. 2001.

Smart J.P., Patel R. e Riley G.S. Oxy-fuel combustion of coal and biomass, the effect on radiative and convective heat transfer and burnout. **Combustion and Flame**, vol. 157(12), p. 2230–40, 2010b.

Smith I.W. The combustion rates of coal chars: a review, Proceedings of the Combustion Institute, vol. 19, p. 1045-1065, 1982.

Simone M., Biagini E., Galletti C. e Tognotti L. Evaluation of global biomass devolatilization kinetics in a drop tube reactor with CFD aided experiments. **Fuel**, vol. 88, p.1818-1827, 2009.

Shafizadeh F e Chin P.S. Thermal deterioration of wood, Chemical Aspects. **ACS Symposium Series**, vol.43, p. 57-81, 1977.

Siegel R. e Howell J.R, Thermal Radiation Heat Transfer. **National Aeronautics and Space Administration**, vol. 1, Washington, 1968.

Siegel R. e Howell J.R. Thermal Radiation Heat Transfer. **Taylor & Francis**, New York-London, 4 ed., 2002.

Silva C.V., Indrusiak M.L.S. e 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.**, vol. XXXII, n. 4, p. 328-336, 2010.

Silva C.V., Conrado E., Indrusiak M.L.S., Stradioto D.A., Vanz R. e Schneider P.S. CFD Analysis of the Combustion Process in a Boiler of a 160 MWe Power Plant. **Journal of the Brazilian Soc. Mechanical Sciences.& Eng.** vol., XXXII, 2019.

Silva C.V., França F.H.R. e 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.**, vol. 179, p. 1605-1630, 2007.

Souza-Santos M.L. Solid Fuels Combustion and Gasefication: Modeling Simulation and Equipment Operation. NY, USA: Marcel Dekker Inc. 2004.

Stradioto D.A. e Vanz R., Silva C.V. e Schneider P. S. Simulação do Processo de Queima em um Reator de Queda Livre (RQL). In: **Congresso Brasileiro de Carvão Mineral**, 2017, Criciúma, 2017.

Taylor P.B. e Foster P.J. The Total Emissivities of Luminous and Non-Luminous Flames. **Journal of Heat Transfer**, vol. 17, p. 1591-1605, 1974.

Tesner P.A., Snegiriova T.D. e Knorre V.G. Kinetics of dispersed carbon formation. **Combustion and Flame**, vol. 17, p. 253-260, 1971

Turns 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. e Gannon R.E. Rapid Devolatilization of Pulverized Coal in Hot Combustion Gases. **Proceeding Softhe Combustion Institute**, p. 427-436, 1976.

Vanz R. **Análise Computacional do Efeito da Transferência de Calor Radiativa na Oxi-combustão de Carvão Russo em uma Instalação de Ensaio de Combustão de 0,5 MW**. Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões – Campus de Erechim, URI, Erechim, 2017.

Velicko A.J. **Análise em CFD do Processo de Co-Combustão de Carvão Mineral com Biomassa Lenhosa: Influência da Umidade**. Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões – Campus de Erechim, URI, Erechim, 2014.

Wang G., Costa M.M.G. e Azevedo J.L.T. **Co-combustion of solid fuels: experiments and modeling**. Thesis approved in public session to obtain the PhD Degree in Mechanical Engineering, U Lisboa, Portugal, 2014.

Warnatz J. e Maas U. **DIBBLE**. R. W. Combustion. Springer, cap. 1, 17, Berlim, 1999.

Wenjing S, Wenqi Z, Aibing Y, Longhai L e Yujun Q. Numerical investigation on the flow, combustion and NO<sub>x</sub> emission characteristics in a 660 MWe tangential firing ultra-supercritical boiler. **Advances in Mechanical Engineering**, vol. 8(2), p. 1–13, 2015.

Westbrook C.K. e Dryer F.L. Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon. **Combust. Sci. Technol**, vol. 27, p. 31-44, 1981.

Williams A., Jones J.M., Ma, L. e Pourkashanian M. Pollutants from the combustion of solid biomass fuels, *Process in Energy and Combustion Science*, vol. 38, p. 113-137, 2012.

Wilcox D.C. Reassessment of the scale-determining equation for advenced turbulence models. **AIAA Journal**, vol. 26, p. 1299-1310, 1988.

Xianchun L., Hui S., QI W., Chatphol M., Terry W. e Jianglong Y. Experimental study on drying and moisture re-adsorption kinetics of an Indonesian low rank coal. **Journal of Environmental Sciences Supplement**, vol. 5, p. 127-130, 2009.

Xu M., Azevedo J.L.T. e Carvalho M.G. Modeling of the combustion process and NOx emission in a utility boiler. **Fuel**, vol. 79, p. 1611-1619, 2000.

Zampieri D. Expressão do Complexo Celulítico em *Penicillium Echinulatum*, 2011;

Zimmer L. **Modelagem da Combustão de Carvão em um Forno de Queda Livre**. Tese (Mestrado em Engenharia) Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2012.

Yang Y.B., Sharifi V.N., Swithenbank J., Ma L., Darvell L.I., Jones J.M., Pourkashanian M. e Williams A. Combustion of a single particle of biomass. **Energy & Fuels**, vol. 22, p. 306-316, 2008.

APENDICE A - A Figura 8.1 apresenta os campos das espécies ao longo do DTF.

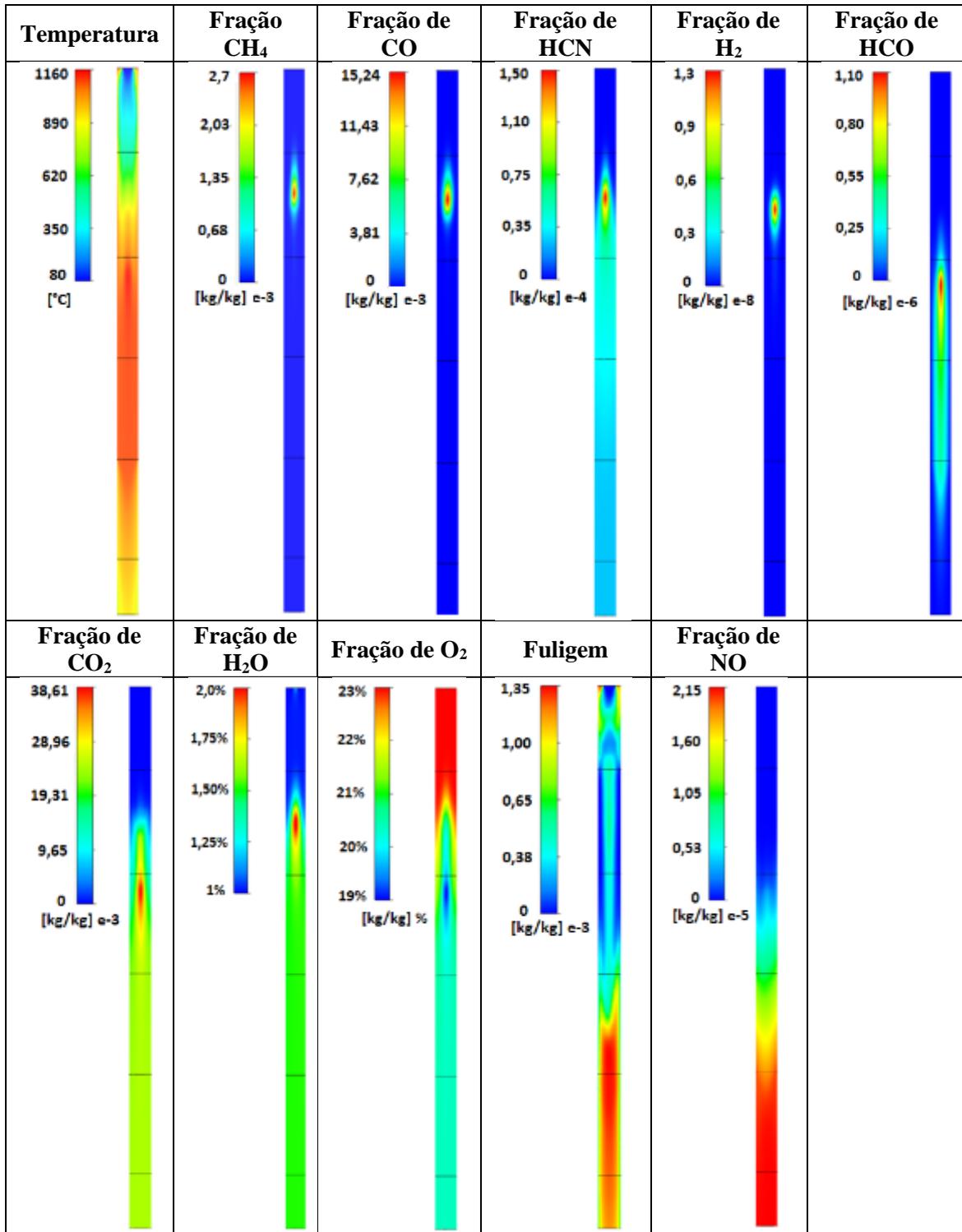


Figura 8.1 – campos das espécies ao longo do DTF.

## ANEXO I - Método numérico computacional

Conforme definido por Patankar, 1980 e Maliska, 2004, um método numérico tem por objetivo resolver um conjunto de equações diferenciais, adotando um método de substituição destas derivadas por expressões algébricas mais simplificadas, com solução analítica, que incorporam a variável a ser determinada. Ao utilizar um método numérico, abre-se mão da exatidão de uma solução analítica para obter um resultado calculado iterativamente, para quantos volumes desejar subdividir o domínio estudado. Desta forma, resolve-se as equações algébricas para cada volume determinado, gerando-se uma solução global. Este resultado apresenta erros, que são gerados à cada iteração, e, espera-se que este erro diminua com o aumento do número de volumes adotados, ou seja, com o refinamento da malha.

Todas as equações da modelagem matemática são resolvidas pelo método dos volumes finitos no qual o software comercial Ansys CFX 15.0 é baseado. O método numérico de Volumes Finitos (MVF) realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume elementar da malha computacional para obter a correspondente equação discreta, satisfazendo a conservação da propriedade a nível dos volumes elementares.

Um método numérico tem como função resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. A Figura A.1 exemplifica a tarefa do método numérico, que é transformar uma equação diferencial, definida no domínio  $D$ , em um sistema de equações algébricas. Para isso, as derivadas da função existentes na equação diferencial devem ser substituídas pelos valores discretos da função. Transformar as derivadas em termos que contém a função significa integrar a equação diferencial, e as diversas maneiras de fazê-lo são o que caracteriza o tipo de método numérico de Maliska, 2004.

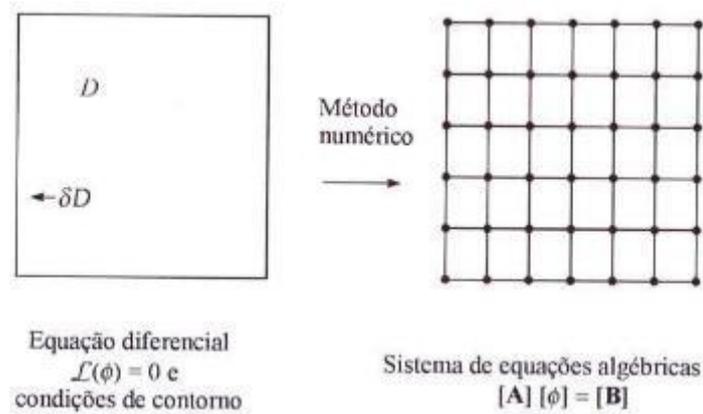


Figura A.1 - A tarefa do método numérico, [Maliska, 2004].

### A.1. Funções de Interpolação

Considera-se o problema unidimensional de advecção/difusão da propriedade  $\phi$  sem os termos, transiente e fonte, obtidos por:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (\text{A.1})$$

onde  $\phi$  representa uma propriedade qualquer transportada e  $\Gamma^\phi$ , o coeficiente de transporte. O objetivo é sempre propor uma função de interpolação com menor erro possível e que, ao mesmo tempo, não envolva muitos pontos nodais para não criar uma matriz com estrutura muito complexa. Outro ponto importante a ser observado é evitar coeficientes negativos, pois isto gera dificuldades na solução. Coeficientes negativos não impossibilitam a obtenção da solução, no entanto, exigem o uso de métodos robustos para resolver o sistema linear.

Sendo assim, adotou-se para o problema em análise, o uso do método de aproximação do termo advectivo *up-wind*. Este método nada mais é que uma aproximação de primeira ordem, de um lado só. Para  $u$  positivo, a aproximação de um lado só resulta na seguinte aproximação numérica:

$$\rho u \phi_P - \rho u \phi_W = \Gamma^\phi \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} - \Gamma^\phi \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x} \quad (\text{A.2})$$

e para  $u$  negativo, a aproximação da Equação A.2, agora com *up-wind* para o outro lado, resulta em:

$$\rho u \phi_E - \rho u \phi_P = \Gamma_\phi \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} - \Gamma_\phi \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x} \quad (\text{A.3})$$

sendo os coeficientes resultantes destas equações todos positivos.

A solução do pulso de  $\phi$  usando esquemas *up-wind* tem a forma mostrada na Figura A.2, onde se pode ver que desaparecem as oscilações numéricas, mas, por outro lado, o pulso dissipou-se, não sendo captado o real gradiente do problema.

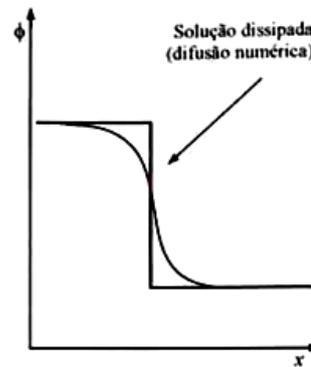


Figura A.2 - Presença de difusão numérica no uso do esquema *up-wind* na aproximação da advecção [Maliska, 2004].

O esquema necessita de um refinamento da malha à medida que o escoamento se torna mais complexo para produzir resultados mais precisos. Segundo Maliska, 2004, enquanto o número de iterações requerida para convergência aumenta linearmente, o tempo computacional aumenta quadraticamente. O esquema *up-wind* produz soluções fisicamente coerentes, mas tem a propriedade de suavizar os altos gradientes, por serem dissipativos.

## A.2. Integração da equação para $\phi$ em três dimensões

Sabendo que a variação de massa é nula para um sistema, a equação da conservação de massa é descrita da seguinte forma:

$$\left. \frac{\Delta m}{\Delta t} \right|_{\text{sistema}} = 0 \quad (\text{A.4})$$

onde  $m$  é a massa no sistema.

Esta equação deve ser integrada no tempo e no espaço como mostrado na Figura A.3 onde, para facilitar a especificação das dimensões, apenas as retas que unem os centros dos volumes de controle são mostradas.

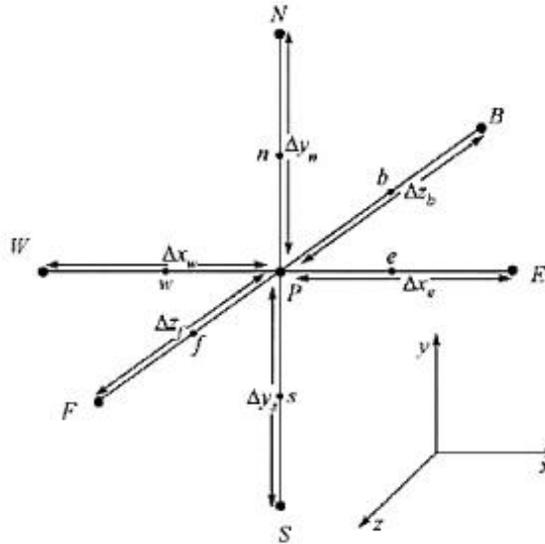


Figura A.3 - Volume elementar tridimensional. [Maliska, 2004].

As seis letras minúsculas  $w$ ,  $n$ ,  $s$ ,  $e$ ,  $b$  e  $f$  identificam as interfaces do volume de controle centrado em  $P$ . A integração no tempo e sobre o volume de controle em  $P$  da equação de conservação para  $\phi$  pode ser feita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 & \int \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV dt + \int \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) dV dt + \int \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) dV dt + \int \frac{\partial}{\partial z} (\rho w \phi) dV dt \\
 & = \int \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV dt + \int \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dV dt \\
 & + \int \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dV dt + \int S^\phi dV dt
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo dessa equação representa o divergente ( $\vec{\nabla}$ ) da propriedade  $\phi$ , do lado direito igualando a questão tem-se o gradiente ( $\vec{\nabla}$ ) da propriedade e  $\int S^\phi dV dt$  representa o termo fonte da propriedade  $\phi$  em questão. Resultando em:

$$\begin{aligned}
& \frac{M_P \Phi_P - M_P^0 \Phi_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e \Phi_e^\theta - \dot{M}_w \Phi_w^\theta + \dot{M}_n \Phi_n^\theta - \dot{M}_s \Phi_s^\theta + \dot{M}_f \Phi_f^\theta - \dot{M}_b \Phi_b^\theta \\
& = D_1 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_e^\theta - D_1 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_e^\theta + D_2 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_n^\theta - D_2 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_s^\theta + D_3 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_f^\theta \\
& - D_3 \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_b^\theta + L[S^\theta]^\theta
\end{aligned} \tag{A.6}$$

sendo que os termos antes da igualdade, na Equação A.6, em função de  $\Phi$ , são os termos advectivos e os termos depois da igualdade, em função de  $\left(\Gamma^\theta \frac{\partial \Phi}{\partial x}\right)$ , são os termos difusivos.

O sobrescrito  $\theta$  significa que a variável em integração ao longo do intervalo de tempo é avaliada em uma posição intermediária entre o instante  $t$  e o instante  $t + \Delta t$ , originando as formulações totalmente implícita, implícita e explícita.

O termo  $L[S^\theta]^\theta$  significa a aproximação numérica do termo entre colchetes e poderá conter o gradiente de pressão se  $\Phi$  for uma das componentes do vetor velocidade.

Para auxiliar a equação aproximada para a variável  $\Phi$ , a equação da conservação de massa deve ser empregada substituindo  $\Phi$  por 1 e considerando o termo fonte como nulo na Equação A.6. A equação da conservação de massa pode ser escrita como:

$$\frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s + \dot{M}_f - \dot{M}_b = 0 \tag{A.7}$$

### A.3 Sistemas de equações a ser resolvido

Cada uma das equações diferenciais deverá ser representada por um sistema de equações algébricas lineares. Para um escoamento tridimensional compressível, têm-se as seguintes equações:

$$A_p u_p = A_e u_E + A_w u_W + A_n u_N + A_s u_S + A_f u_F + A_b u_B - L[P^u] \Delta V + B_p^u \tag{A.8}$$

$$A_p v_p = A_e v_E + A_w v_W + A_n v_N + A_s v_S + A_f v_F + A_b v_B - L[P^v] \Delta V + B_p^v \tag{A.9}$$

$$A_p w_p = A_e w_E + A_w w_W + A_n w_N + A_s w_S + A_f w_F + A_b w_B - L[P^w] \Delta V + B_p^w \tag{A.10}$$

$$A_p T_p = A_e T_E + A_w T_W + A_n T_N + A_s T_S + A_f T_F + A_b T_B + B_p^T \tag{A.11}$$

$$\frac{M_P - M_P^0}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s + \dot{M}_f - \dot{M}_b = 0 \tag{A.12}$$

$$P = P(\rho, T) \quad (\text{A.13})$$

onde a Equação A.13 é a equação de estado usada para fechamento do problema, e  $u$ ,  $v$ ,  $w$ ,  $P$ ,  $T$  e  $\rho$  são as três componentes do vetor velocidade, a pressão, a temperatura e a massa específica, e  $B_p^T$  é o termo fonte da equação.

Ao se tentar resolver essas equações, a primeira decisão a ser tomada é quanto à natureza da solução, segregada ou acoplada. A solução acoplada é inviável em função das extraordinárias dimensões que a matriz resultante iria atingir para o caso em estudo, devido ao grande número de elementos que compõem a malha. Sendo assim, a única opção para solução deste problema é a solução segregada dos sistemas de equações, isto é, resolver os sistemas lineares um a um, atualizando os coeficientes.

#### A.4 Método simple

A técnica utilizada durante muito tempo para evitar o problema do acoplamento foi resolver equações em termos da função de corrente e da vorticidade. Com essa prática, um problema bidimensional, cujas incógnitas são as componentes do vetor velocidade e a pressão, reduz-se a um problema de duas incógnitas: a função de corrente e a vorticidade, desaparecendo da formulação a pressão. Um inconveniente é a necessidade de fornecer condições de contorno para a vorticidade, uma variável de interpretação física não fácil e não conhecida como condição de contorno primitiva do problema. Outro inconveniente é o acoplamento entre a função de corrente e a vorticidade, via condições de contorno, tornando o processo iterativo bastante instável e de convergência lenta, segundo Maliska, 2004.

Existem atualmente diversos métodos para tratar desse acoplamento. O objetivo de todos eles é criar uma equação para a pressão que permita que o processo iterativo avance, observando a conservação da massa. Na construção de qualquer algoritmo, a realimentação adequada do processo é fundamental para se obter uma boa velocidade de convergência. No caso do acoplamento em questão, o resíduo de massa, calculado através da equação da conservação da massa é o dado fundamental para indicar a maneira como o novo campo de pressão deve ser alterado. Existem diversas maneiras de se ir ajustando as variáveis durante o processo iterativo até se obter a solução do problema, quando então todas as equações de conservação envolvidas estarão satisfeitas. Vários foram os precursores nos

desenvolvimentos de métodos para tratar o acoplamento de pressão-velocidade. Com base nas ideias de Chorin, muitos outros foram desenvolvidos dos quais alguns dos mais difundidos na comunidade científica serão citados aqui:

- Método de Chorin;
- Método Simple–SemiImplicitLinkedEquations;
- Método Simpler;
- Método Prime – PressureImplicit Momentum Explicit;
- Método Simplec – Simple Consistente.

Um dos métodos mais largamente empregado até bem recentemente, e do qual, por sua vez derivam muitos outros, é o método SIMPLE, desenvolvido por Patankar, 1980. Neste método, a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa da pressão disponível,  $P^*$ , mais uma correção  $P'$ , que é calculada de maneira a satisfazer a equação da continuidade, ou seja,  $P = P^* + P'$ . Este método para tratamento do acoplamento pressão-velocidade, a sequência de cálculo envolve dois passos distintos: no primeiro as velocidades são corrigidas de modo a satisfazer a equação de conservação de massa, no segundo, as pressões são avançadas para completar o ciclo iterativo. As equações para a correção das velocidades são obtidas a partir das equações de movimento e resultam em:

$$u_P = u_P^* - \frac{\Delta V \Delta P'}{A_P \Delta x} \quad (\text{A.14})$$

$$v_P = v_P^* - \frac{\Delta V \Delta P'}{A_P \Delta y} \quad (\text{A.15})$$

$$w_P = w_P^* - \frac{\Delta V \Delta P'}{A_P \Delta z} \quad (\text{A.16})$$

Resta, agora, obter uma equação para determinar  $P'$ , tal que, quando substituído nas Equações A.14 a A.16, origine velocidades  $u$ ,  $v$  e  $w$  que satisfaçam a equação da conservação da massa. Para tanto, basta substituir as Equações A.14 a A.16 na equação da conservação de massa discretizada para o volume, Equação A.12, obtendo-se uma equação de Poisson para  $P'$ , na forma:

$$A_p P'_p = A_e P'_e + A_w P'_w + A_s P'_s + A_n P'_n + A_f P'_f + A_b P'_b - \nabla \cdot V^* \quad (\text{A.17})$$

Encontrando  $P'$ , as velocidades são então corrigidas, obtendo-se um campo de velocidades que satisfaz a equação da conservação de massa.

É possível agora realizar o segundo passo, que é calcular a pressão  $P$  através de:

$$P = P^* + P' \quad (\text{A.18})$$

Para o novo ciclo iterativo,  $P^*$  é feito igual ao novo  $P$ , e um novo campo de velocidades estimado é calculado, dando-se sequência ao mesmo processo, até obter-se a convergência dentro de parâmetros estipulados.

Neste ponto, é importante ressaltar que a Equação A.18 não tem uma fundamentação física que a suporte. Ela não é obtida nem a partir da equação da conservação de massa nem da equação da conservação da quantidade de movimento. É apenas uma maneira simples de avançar os valores de  $P$ . O termo  $P'$  tem um significado físico muito forte nas Equações A.14 a A.16, mas não tem na Equação A.18. Essa é a razão por que é necessário aplicar um coeficiente de sub-relaxação severo em  $P'$ , do tipo:

$$P = P^* + \alpha P' \quad (\text{A.19})$$

para que se possa obter a convergência do sistema de equações. A descrição completa do método Simple contemplando todas as deduções de equações pode ser encontrada em Maliska (2004).

## A.5 Fluxograma de metodologia de resolução do ANSYS CFX/SOLVER

O software utilizado para realizar as simulações foi o Ansys CFX v. 15.0. A Figura A.4 apresenta o fluxograma seguido à cada iteração realizada no software.

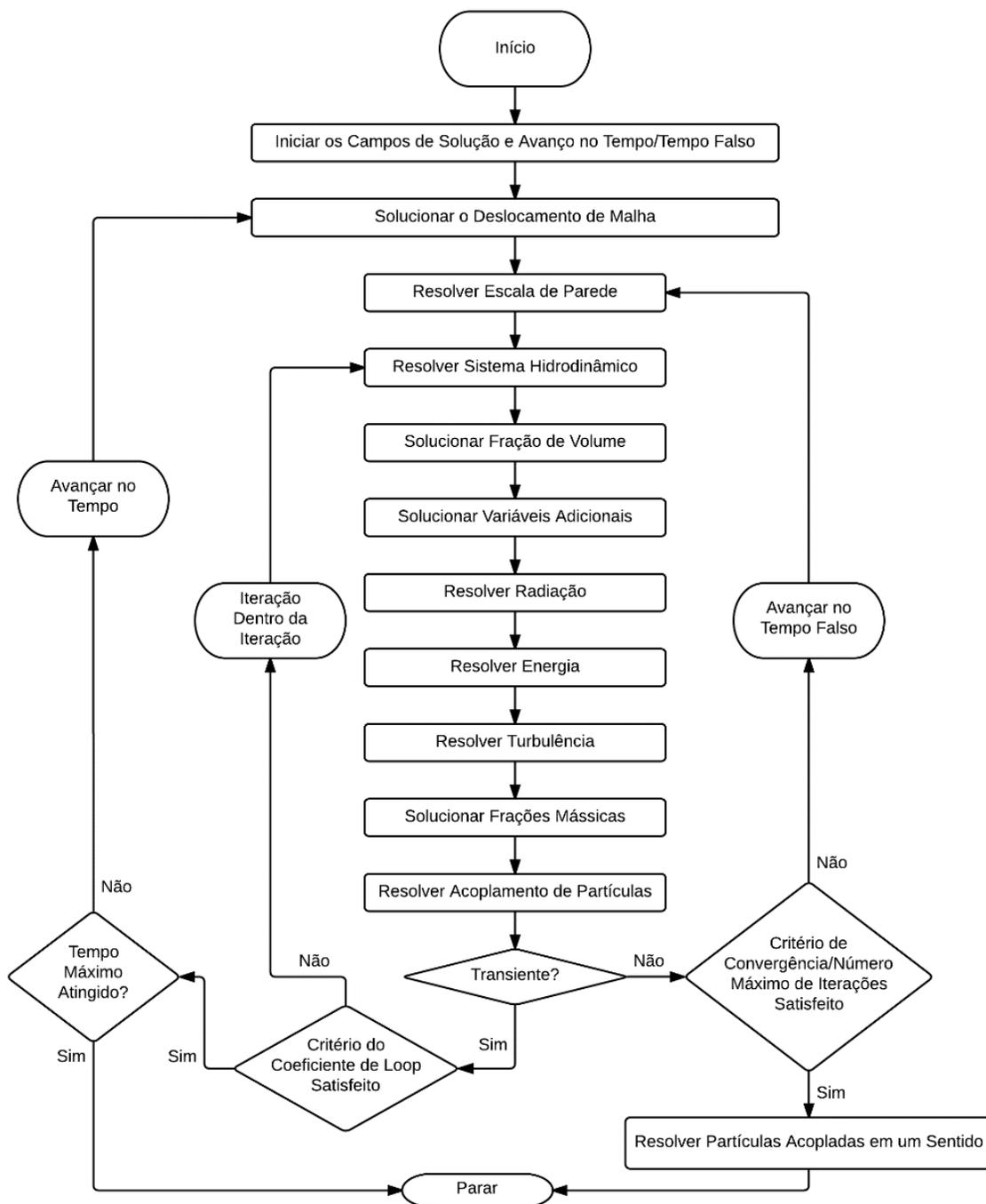


Figura A.4 - Fluxograma de resolução adotado pelo Ansys CFX. [Adaptado de ANSYS, 2013].

A solução de cada conjunto de equações presentes no modelo computacional consiste de duas operações numéricas intensivas, sendo elas:

- a) Geração do coeficiente: equações não-lineares são linearizadas e inseridas na matriz solução;

b) Solução da equação: as equações lineares são resolvidas utilizando o método *AlgebraicMultigrid*, o qual é explicado abaixo.

O *AlgebraicMultigrid* é um método de convergência por inversão de matrizes aprimorado. Este processo envolve a realização de iterações iniciais em uma malha fina (a malha original) e iterações posteriores em uma malha virtual mais grosseira. Os resultados obtidos são então transferidos da malha grosseira para a malha original [ANSYS, 2013].

Este método forma um sistema de equações discretas para a malha grosseira por meio da soma das equações da malha original. Isso resulta em um engrossamento virtual do espaçamento da malha durante o curso das iterações, posteriormente, refinando-a para obter uma solução mais precisa. O Ansys CFX utiliza uma implementação do método *AlgebraicMultigrid*, chamada de Correção Aditiva. Isto se torna plausível pelo fato de que as equações discretas são representantes do equilíbrio das quantidades conservadas ao longo do volume de controle. As equações para a malha grosseira podem ser criadas unindo os volumes de controle originais para criar volumes maiores, como pode-se observar na Figura A.5. Assim, as equações da malha grosseira impõem requisitos de conservação ao longo de um volume maior, resultando em uma redução de erros [ANSYS, 2013].

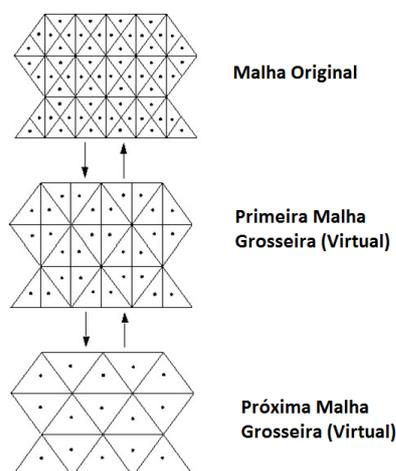


Figura A.5 - Variação dos volumes de controle da malha durante a solução de um problema no Ansys CFX. [Adaptado de ANSYS, 2013].